



universität  
wien

# DIPLOMARBEIT

Kaffeeröstaromastoffe  
und Duft im Klassischen Wiener Kaffeehaus:  
Analyse mittels HS-SPME-GC-MS

angestrebter akademischer Grad

**Magistra der Naturwissenschaften (Mag. rer. nat.)**

<b>Verfasserin:</b>	Patricia Pauzenberger
<b>Matrikel-Nummer:</b>	0100931
<b>Studienrichtung:</b>	A474 Ernährungswissenschaften
<b>Betreuer:</b>	Univ.-Prof. Mag. Dr. Gerhard Buchbauer

Wien, im April 2009



*für meine Eltern*



## **DANKSAGUNG**

An dieser Stelle möchte ich mich allererst bei Herrn Univ. Prof. Mag. Dr. Gerhard Buchbauer für die Ermöglichung und Durchführung dieser Diplomarbeit, für das freundliche Entgegenkommen in administrativen Fragen und auch für das Lesen dieser Arbeit, sehr herzlich bedanken.

Ein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Edelbauer einerseits für die Bereitstellung der gesamten Kaffeeproben & andererseits für die zahlreichen netten Gespräche bei einem hervorragenden Kaffee. Herrn Prof. Edelbauer habe ich auch mein gesamtes „Kaffeewissen“ zu verdanken, da er mir ermöglichte, den von ihm geleiteten Kaffee-Experten-Kurs in der Volkshochschule Hietzing zu absolvieren.

Außerdem danke ich allen lieben Laborkollegen/Innen, die ich in dem vergangen letzten Jahr kennen gelernt habe: Danke René, Susi, Steffi, Eva und Iris. An dieser Stelle möchte ich mich auch bei meiner Kollegin Marianne Pestitschek für die gute Zusammenarbeit bedanken.

Größten Dank gilt meinen lieben Eltern, denen ich auch als Anerkennung für ihre langjährige Unterstützung und Förderung diese Diplomarbeit widmen möchte. An dieser Stelle möchte ich auch meiner lieben Oma und Tante Hanni & Onkel Billi für ihren großzügigen finanziellen Zuschuss danken.

Anschließend möchte ich meiner lieben Schwester und ihrer Familie für ihre immer da gewesene Zuwendung danken.

Schließlich möchte ich mich bei meinem lieben Freund Michael bedanken, der mich auf jede mögliche Art und Weise unterstützt und motiviert hat und mich mit seinem Humor immer bei Laune hielt.

Besonderen Dank spreche ich Birgit, Susi und Petra aus, die mir immer und vor allem auf den letzten Metern treu und zuverlässig zur Seite standen.

Last but not least danke ich all meinen Freunden, die sich geduldig mein Jammern angehört haben und mich mental unterstützt haben. Ihr allesamt seid´s die Besten!

# INHALTSVERZEICHNIS

<b>Inhaltsverzeichnis</b>	<b>I</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>VI</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>VIII</b>
<b>Abkürzungsverzeichnis</b>	<b>X</b>
<b>1. Einleitung und Fragestellung</b>	<b>1</b>
<b>2. Literaturübersicht</b>	<b>3</b>
2.1. Kaffee – Definition	3
2.2. Kaffeebaum	3
2.2.1. Wurzeln und Blätter	4
2.2.2. Blüte	4
2.2.3. Kaffeekirschen	5
2.3. Standortansprüche der Kaffeepflanze	5
2.3.1. Bodenbeschaffenheit	5
2.3.2. Höhenlage	6
2.3.3. Klimabedingungen	6
2.4. Kaffeeernte	7
2.4.1. “Picking” und “Stripping”	7
2.4.2. Aufbereitung der Kaffeekirschen	8
2.4.2.1. Trockene Aufbereitung	8
2.4.2.2. Nasse Aufbereitung	9
2.5. Rohkaffee	11
2.5.1. Zusammensetzung des Rohkaffees	12
2.6. Röstung	14
2.7. Herstellung des Kaffeegetränks	15

---

2.8.	Qualität des Kaffeegetränks	16
2.8.1.	Zubereitungsmethode	16
2.8.1.1.	Filterkaffeemaschine	16
2.8.1.2.	Espressomaschine	17
2.8.1.3.	Espressokanne	17
2.8.1.4.	Türkischer Kaffee	17
2.8.1.5.	Karlsbader-Kanne	18
2.8.2.	Mahlgrad	18
2.8.3.	Dosierung	19
2.8.4.	Qualität des Wassers und pH-Wert	19
2.8.5.	Brühtemperatur und -zeit	20
2.8.6.	Standzeit des aufgebrühten Kaffees	20
2.8.7.	Aufbewahrung und Lagerung	20
2.9.	Inhaltsstoffe des Kaffeegetränks	21
2.10.	Kaffeearomastoffe	21
2.10.1.	Flüchtige Verbindungen und Aromastoffe im Rohkaffee	22
2.10.2.	Flüchtige Verbindungen und Aromastoffe im Röstkaffee	25
2.10.3.	Flüchtige Verbindungen und Aromastoffe im Kaffeegetränk	30
2.10.4.	Flüchtige Verbindungen und Aromastoffe im Unterschied <i>Arabica</i> - und <i>Robusta</i> -Kaffeegetränk	33
2.10.5.	Aromastoffe im Kaffeegetränk aus Röstkaffee verschiedener technologischer Aufbereitung	36
2.11.	Das Klassische Kaffeehaus in Wien	39
2.11.1.	Der „Kaffeehausmarkt“ in Wien	39
2.11.2.	Gründung der ersten Kaffeehäuser	39
2.11.3.	Das „Wiener Kaffeehaus“	40
2.11.4.	Begründer des Wiener Kaffeehauses	40
2.11.4.1.	Georg Franz Koltschitzky – der legendäre Begründer des Wiener Kaffeehauses	41
2.11.4.2.	Johannes Diodato – Wiens erster hofbefreiter Kaffeesieder	42
2.11.4.3.	Isaak de Luca – Wiens erster bürgerlicher Kaffeesieder	43
2.11.5.	Das traditionelle Wiener Kaffeehaus – seine Anfänge und Verbreitung in Wien	44
2.11.6.	Die Besonderheiten des traditionellen Wiener Kaffeehauses	46

---

2.12. Traditionelle Wiener Kaffeehäuser – WWTF-Projekt	48
2.12.1. <i>Kleines Café</i> - Alternativ-Café mit kleinem Angebot	48
2.12.1.1. Einrichtung und Atmosphäre	49
2.12.1.2. Speisen und Getränke	49
2.12.1.3. Publikum	50
2.12.2. <i>Café Ritter</i> – Stadtcafé im Vorortbezirk	51
2.12.2.1. Einrichtung und Atmosphäre	52
2.12.2.2. Speisen und Getränke	52
2.12.2.3. Publikum	53
2.12.3. <i>Die AIDA</i> – Café-Konditorei	54
2.12.3.1. Einrichtung und Atmosphäre	55
2.12.3.2. Speisen und Getränke	56
2.12.3.3. Publikum	57
2.13. Probenanreicherung – Solid Phase Microextraction (SPME)	58
2.13.1. Allgemeines	58
2.13.2. Entwicklung der SPME	59
2.13.3. Anwendungsbereiche der SPME-Methode	59
2.13.4. Nachweisgrenzen der SPME	60
2.13.5. Aufbau der SPME-Faser/Faserhalter	60
2.13.6. Prinzip der SPME-Methode	61
2.13.6.1. Direkte Anreicherung aus wässrigen Lösungen (Direct Immersion)	62
2.13.6.2. Anreicherung aus dem Dampfraum (Headspace)	62
2.14. Grundlagen der Gaschromatographie (GC)	64
2.14.1. Definition	64
2.14.2. Schematischer Aufbau und Prinzip eines Gaschromatographen	64
2.14.2.1. Trägergase	65
2.14.2.2. Einspritzblock oder Probeninjektor	66
2.14.2.3. Trennsäule	66
2.14.2.4. Detektoren	67
2.14.3. Das Chromatogramm und seine Aussage	67
2.14.4. Retentionsindizes nach Kovats	68
2.15. Grundlagen der Massenspektrometrie (MS)	69
2.15.1. Aufbau eines Massenspektrometers	69
2.15.1.1. Einlasssystem	70

---

2.15.1.2.	Ionenquelle	70
2.15.1.3.	Trenn- oder Analysatorsystem bzw. Massenselektor	71
2.15.1.4.	Detektor	71
<b>3.</b>	<b>Material und Methoden</b>	<b>73</b>
3.1.	Methodenentwicklung für GC-MS-Untersuchungen mittels HS-SPME	73
3.1.1.	Raumlufanalyse von Klassischen Wiener Kaffeehäusern mittels HS-SPME-GC-MS	73
3.1.2.	Aromaanalyse von ausgewählten <i>Arabica</i> - und <i>Robusta</i> -Sorten mittels HS-SPME-GC-MS	75
3.1.2.1.	Probenauswahl	75
3.1.2.2.	Röstung der ausgewählten Kaffeesorten	76
3.1.2.3.	Probenvorbereitung	78
3.1.2.4.	Zubereitung der gemahlenden Kaffeebohnen	79
3.1.2.5.	Probennahme von frisch gebrühten Kaffee mittels HS-SPME	79
3.1.3.	Entwickelte Methode	80
3.1.3.1.	Manuelle HS-SPME-Vorrichtung und verwendete Faser	81
3.1.3.2.	Gaschromatographische – massenspektrometrische Parameter	81
3.1.3.3.	Analytische Bedingungen – technische Daten	83
3.1.3.4.	Auswertung des Massenspektrums	84
3.1.3.5.	Auswertung der GC-Chromatogramme	85
<b>4.</b>	<b>Ergebnisse und Diskussion</b>	<b>89</b>
4.1.	Untersuchung der Kaffeegetränke mittels HS-SPME-GC-MS	89
4.1.1.	Qualitative Auswertung der <i>Robusta Madagaskar</i> Rohbohnen	89
4.1.2.	Qualitative Auswertung des <i>Robusta Madagaskar</i> Kaffeegetränk	97
4.1.3.	Qualitative Auswertung des <i>Arabica Santos</i> Kaffeegetränk	106
4.1.4.	Qualitative Auswertung des <i>Arabica Sidamo</i> Kaffeegetränk	115
4.1.5.	Zusammenfassung der Ergebnisse <i>Robusta Madagaskar</i> Rohkaffee und Kaffeegetränk, <i>Arabica Santos</i> und <i>Arabica Sidamo</i>	122
4.2.	Untersuchungen der Innenraumluf Klassischer Wiener Kaffeehäuser mittels HS-SPME-GC-MS	127
4.2.1.	Zigarettenrauch-Ausschlusstest	128
4.2.2.	Allgemeines zu den Kaffeehaus-Messungen	130
4.2.3.	Qualitative Auswertung der Innenraumluf des <i>KLEINEN CAFÉS</i>	133



---

4.2.3.1.	Allgemeines _____	133
4.2.3.2.	Auswertung des „Acht-Stunden“-Chromatogramms _____	134
4.2.4.	Qualitative Auswertung der Innenraumluft des <i>CAFÉ RITTER</i> _____	148
4.2.4.1.	Allgemeines _____	148
4.2.4.2.	Auswertung des „Acht-Stunden“-Chromatogramms _____	150
4.2.5.	Qualitative Auswertung der Innenraumluft der CAFÉ-KONDITIONE <i>AIDA</i> _____	161
4.2.5.1.	Allgemeines _____	161
4.2.5.2.	Auswertung des „Acht-Stunden“-Chromatogramms _____	163
<b>5.</b>	<b>Schlussbetrachtung _____</b>	<b>179</b>
5.1.	Allgemeines zu den Düften Wiener Kaffeehäuser _____	179
5.2.	Charakteristische Substanzen der Innenraumluft des <i>Kleinen Cafés</i> _____	180
5.3.	Charakteristische Substanzen der Innenraumluft des <i>Café Ritter</i> _____	183
5.4.	Charakteristische Substanzen der Innenraumluft der Café-Konditione <i>Aida</i> _____	185
<b>6.</b>	<b>Zusammenfassung _____</b>	<b>191</b>
<b>7.</b>	<b>Summary _____</b>	<b>193</b>
<b>8.</b>	<b>Literaturverzeichnis _____</b>	<b>195</b>
<b>9.</b>	<b>Anhang _____</b>	<b>203</b>

## TABELLENVERZEICHNIS

Tabelle 1	Inhaltsstoffe von Rohkaffee ( <i>Arabica</i> und <i>Robusta</i> ).....	13
Tabelle 2	Inhaltsstoffe eines <i>Arabica</i> -Kaffeegetränks.....	21
Tabelle 3	Konzentrationen und Geruchsintensitäten flüchtiger Komponenten im Rohkaffee.....	23
Tabelle 4	Geruchspotente Aromastoffe im Rohkaffee .....	25
Tabelle 5	Einteilung der 835 Kaffeearomastoffe in Verbindungsklassen.....	27
Tabelle 6	Konzentrationen und Aromawerte geruchspotenter Aromastoffe in <i>Arabica</i> - und <i>Robusta</i> -Röstkaffee.....	28
Tabelle 7	Konzentrationsvergleich ausgewählter Aromastoffe in Roh- und Röstkaffee derselben Sorte.....	30
Tabelle 8	Konzentration geruchspotenter Aromastoffe im <i>Arabica</i> -Kaffee und deren Ausbeute bei der Herstellung des Kaffeegetränks.....	32
Tabelle 9	„Key Aroma Compounds“ für den Unterschied zwischen <i>Arabica</i> - und <i>Robusta</i> -Varietäten.....	34
Tabelle 10	Konzentrationen und Aromawerte von geruchspotenten Aromastoffe im Kaffeegetränk unterschiedlicher <i>Arabica</i> - und <i>Robusta</i> -Varietäten. ....	35
Tabelle 11	Aromastoffe mit hohen FD-Faktoren im Kaffeegetränk (Peru 2001) nasser und trockener Aufbereitung. ....	37
Tabelle 12	Geruchspotente Aromastoffe im <i>Robusta Madagaskar</i> Rohkaffee, 24-Stunden Messung mittels HS-SPME-GC-MS .....	92
Tabelle 13	Geruchspotente Aromastoffe im <i>Robusta Madagaskar</i> Kaffeegetränk, 24-Stunden Messung mittels HS-SPME-GC-MS.....	99
Tabelle 14	Geruchspotente Aromastoffe im <i>Arabica Santos</i> Kaffeegetränk, 24-Stunden Messung mittels HS-SPME-GC-MS .....	108
Tabelle 15	Geruchspotente Aromastoffe im <i>Arabica Sidamo</i> Kaffeegetränk 24-Stunden Messung mittels HS-SPME-GC-MS .....	118
Tabelle 16	Auszug der Substanzen im Zigarettenrauch; Messung mittels HC- SPME-GC-MS .....	130

---

Tabelle 17	Substanzen der achtstündigen Raumlufthmessung des <i>Kleinen Café</i> mittels HS-SPME-GC-MS .....	136
Tabelle 18	Substanzen der achtstündigen Raumlufthmessung im <i>Café Ritter</i> mittels HS-SPME-GC-MS .....	152
Tabelle 19	Substanzen der achtstündigen Raumlufthmessung der <i>Café-Konditorei Aida</i> mittels HS-SPME-GC-MS .....	165
Tabelle 20	Vergleichende Darstellung ausgewählter Kaffeehaus-Substanzen mit Rohkaffee, Kaffeegetränke und Zigarettenrauch.....	177

## ABBILDUNGSVERZEICHNIS

Abbildung 1	Kaffeeblätter, -kirschen und -blüten .....	4
Abbildung 2	Schematische Darstellung des nass und trocken aufbereiteten Rohkaffees .....	11
Abbildung 3	Karlsbader-Kanne .....	18
Abbildung 4	Innenräume des <i>Kleinen Cafés</i> .....	48
Abbildung 5	Innenräume des <i>Café Ritter</i> .....	51
Abbildung 6	Innenräume der Café-Konditorei <i>Aida</i> .....	54
Abbildung 7	Schematische Darstellung: SPME-Faser und Faserhalter .....	61
Abbildung 8	Schematische Darstellung einzelner Schritte bei der Durchführung von Analysen mittels SPME-Methode .....	63
Abbildung 9	Prinzipieller Aufbau eines gaschromatographischen Systems ...	65
Abbildung 10	Blockbild eines Massenspektrometers und Funktion der Baugruppen .....	70
Abbildung 11	Verwendete Kaffeesorten (Rohkaffe <i>Madagaskar</i> ; Röstkaffee <i>Madagaskar</i> , <i>Santos</i> ; <i>Sidamo</i> ) .....	78
Abbildung 12	Kaffeegetränk im Sample Vial mit manueller HS-SPME- Vorrichtung .....	80
Abbildung 13	Manueller SPME-Faserhalter mit eingebauter Faser.....	81
Abbildung 14	Gaschromatograph - Massenspektrometer (Gerätekombination) mit SPME-Faser im Injektorblock; Interface .....	82
Abbildung 15	Massenspektrum von Furfurylacetat; Struktur und Molekülion ..	85
Abbildung 16	Informationen in einer handelsüblichen Bibliothek am Beispiel Furfurylalkohol.....	87
Abbildung 17	Chromatogramm: Rohbohnen <i>Robusta Madagaskar</i> ; 24-Stunden- Messung mittels HS-SPME .....	90
Abbildung 18	Chromatogramm: Kaffeegetränk <i>Robusta Madagaskar</i> ; 24- Stunden-Messung mittels HS-SPME .....	97
Abbildung 19	Chromatogramm: Kaffeegetränk <i>Arabica Santos</i> ; 24-Stunden- Messung mittels HS-SPME .....	106

---

Abbildung 20 Chromatogramm: Kaffeegetränk <i>Arabica Sidamo</i> ; 24-Stunden-Messung mittels HS-SPME .....	116
Abbildung 21 Chromatogramm: Ausschlusstest-Zigarettenrauch mittels HS-SPME .....	129
Abbildung 22 Chromatogramm: <i>Kleines Café</i> ; 8-Stunden-Messung mittels SPME-Faser.....	134
Abbildung 23 Chromatogramm: <i>Café Ritter</i> ; 8-Stunden-Messung mittels SPME-Faser .....	150
Abbildung 24 Chromatogramm: Café-Konditorei <i>Aida</i> ; 8-Stunden-Messung mittels SPME-Faser .....	163

## ABKÜRZUNGSVERZEICHNIS

°	.....	Grad
°C	.....	Grad Celsius
°dH	.....	Grad deutscher Härte
µA	.....	Mikroampere
µg/kg	.....	Mikrogramm pro Kilogramm
µg/l	.....	Mikrogramm pro Liter
µl	.....	Mikroliter
µm	.....	Mikrometer
Abb.	.....	Abbildung
Abk.	.....	Abkürzung
AEVA	.....	Aromaextraktverdünnungsanalyse
amu	.....	1 amu = $1.66053886 \times 10^{-27}$ kg atomic mass unit
Artikelnr.	.....	Artikelnummer
Asp.	.....	L-Asparaginsäure
BTEX	.....	Abk. für aromatische Kohlenwasserstoffe: Benzol-Toluol-Ethylbenzol-Xylol
BTX	.....	Benzol-Toluol-Xylol
bzw.	.....	beziehungsweise
C.	.....	Coffea
ca.	.....	cirka
CAS-Nr.	.....	Chemical Abstracts Service-Nummer
d.h.	.....	das heißt
DI	.....	Direct Immersion
DVB/CAR/PDMS.....		Divinylbenzen/Carboxen/Polydimethylsiloxan
EI	.....	Elektronenstoßionisation
et al.	.....	et alii = und andere
etc.	.....	et cetera = und so weiter
eV	.....	1 Elektronenvolt = $1.60217646 \times 10^{-19}$ Joule

---

Fa.	.....	Firma
FD	.....	Flavour Dilution; Verdünnungsfaktor
FID	.....	Flammenionisationsdetektor
g	.....	Gramm
g/l	.....	Gramm pro Liter
GC	.....	Gaschromatographie
GC-MS	.....	Gaschromatographie-Massenspektrometrie (Kopplung)
Glu	.....	L-Glutaminsäure
HPLC	.....	High Pressure Liquid Chromatography
HRGCO	.....	High resolution gas chromatography olfactometry
Hrsg.	.....	Herausgeber
HS	.....	Headspace
HVA	.....	Headspaceverdünnungsanalyse
I	.....	Retentionsindex
ID	.....	Innendurchmesser
IR	.....	Infrarot
IVA	.....	Isotopenverdünnungsanalyse
k.A.	.....	keine Angabe
LCKW	.....	leichtflüchtige Chlorkohlenwasserstoffe
m	.....	Meter
m/z	.....	Masse-Ladungs-Verhältnis
M <sup>+</sup>	.....	Molekülion
mg/kg	.....	Milligramm pro Kilogramm
mg/l	.....	Milligramm pro Liter
MIB	.....	Methylisoborneol
MID	.....	Multiple Ion Detection
min	.....	Minuten
ml	.....	Milliliter
ml/min	.....	Milliliter pro Minute
mm	.....	Millimeter
MS	.....	Massenspektrometrie

---

n.a.	.....	nicht analysiert
na	.....	nass
ng/l	.....	Nanogramm pro Liter
NIST	.....	National Institute of Standards and Technology
NMR	.....	Kern(spin)resonanzspektroskopie
Nr.	.....	Nummer
Pa	.....	Pascal
PDMS	.....	Polydimethylsiloxan
PER	.....	Tetrachlorethen
pH	.....	potentia hydrogenii = pH-Wert
PHB	.....	para-Hydroxybenzoesäure
ppm	.....	part per million = $10^{-6}$
ppt	.....	part per trillion = $10^{-12}$
R <sub>t</sub>	.....	Retentionszeit
SIM	.....	Selected Ion Monitoring
sog.	.....	so genannt(e)
SPME	.....	Solid Phase Microextraction
TIC	.....	Total Ion Current
tr	.....	trocken
u.a.	.....	und andere, unter anderem
UV/VIS-	.....	Ultraviolett/sichtbar-
vgl.	.....	vergleiche
WLD	.....	Wärmeleitfähigkeitsdetektor
WWTF	.....	Wiener Wissenschafts-, Forschungs- und Technologiefonds
z.B.	.....	zum Beispiel



# KAPITEL I

## 1. EINLEITUNG UND FRAGESTELLUNG

Kaffee, das Getränk mit den meisten flüchtigen Aromastoffen, hat in Österreich einen durchschnittlichen Pro-Kopf-Verbrauch von 8.00 kg, somit nimmt Österreich in Europa eine Spitzenposition – vor Deutschland mit 6.20 kg (Stand 2005) – ein [ÖSTERREICHISCHER KAFFEE- und TEEVERBAND, 2005].

Da der Kaffeeconsum tendenziell steigt, hat auch die Wiener Kaffeetradition in Österreich einen hohen und einzigartigen Stellenwert eingenommen. In klassischen Wiener Kaffeehäusern legt man, im Gegensatz zur italienischen Kaffeekultur, Wert auf 100%ige *Arabica*-Kaffeemischungen. Dies wird auch, bei der im Zuge dieser Diplomarbeit gemessenen Raumluft der Kaffeehäuser *Aida*, *Kleines Café* und *Ritter* angeboten. Die Zubereitungsarten reichen von Filtermaschine bis Espressoautomat, was natürlich einen wesentlichen Einfluss auf die Kaffeearomaausdehnung nimmt.

Daneben spielen auch andere Gegebenheiten eine Rolle. Besonders das Wetter hat Einfluss – bei Regenwetter wird meist mehr Kaffee konsumiert als bei sommerlichen Temperaturen. Auch die Einrichtung vor allem die Raumhöhe, die Besucherzahl, die Raucher- Nichtraucherzonen tragen zur Aromaausbreitung bei.

Im Zuge dieser Arbeit werden in den genannten Wiener Kaffeehäusern deren Düfte gezielt und effektiv „eingefangen“, um herauszufinden, ob man Kaffeeduft nicht nur olfaktorisch wahrnehmen, sondern auch analytisch nachweisen kann. Eine SPME-Faser wurde dabei drei, sechs und acht Stunden im Kaffeehaus aufgestellt und im Labor der Riechstoffforschung im Department für Klinische Pharmazie und Diagnostik ausgewertet.

Diese Messungen fanden im Rahmen eines dreijährigen Projekts des Wiener Wissenschafts-, Forschungs- und Technologiefonds (WWTF) – “*Haptic and Olfactory Design, Resources for Vienna's Creative*” statt.

Zur Herstellung von Aromaextrakten werden in der Riechstoffchemie meist die „Headspace-Technik“, die Flüssig-Flüssig-Extraktion, die simultane Destillation/Extraktion und die Wasserdampfdestillation angewendet. Diese Techniken sind mit hohem Personal- und Zeitaufwand und Lösungsmitelesatz verbunden und führen zu einer schlechten Matrixabtrennung (Flüssig-Flüssig-Extraktion) und der Artefaktbildung im Fall thermischer Verfahren. Die erst in den letzten Jahren des 20. Jhd. entwickelte Solid-Phase Microextraction (Festphasenmikroextraktion) minimiert bzw. besitzt die Nachteile der zuvor genannten Techniken nicht. Bei diesem neuen Extraktionsprinzip handelt es sich um eine Anreicherungstechnik, die ohne den Einsatz von organischen Lösungsmitteln auskommt [ARTHUR und PAWLISZYN, 1990]. Ein weiterer Vorteil ist der verhältnismäßig geringe Zeitaufwand für eine Analyse in Kombination mit Gaschromatographie gekoppelt mit Massenspektrometrie. Ferner können bei dieser Technik die zur Extraktion benötigten Fasern mehrfach verwendet werden. Demgemäß stellt die Festphasenmikroextraktion eine leistungsfähige, kostengünstige und innovative Alternative zu bestehenden Extraktionsverfahren in der Aromastoffanalytik dar.

Folglich wurde im Rahmen dieser Arbeit mittels „Solid-Phase Microextraction“ und die Gaschromatographie in Kopplung mit Massenspektrometrie als effiziente Analysemethode zur Bestimmung von relevanten „*character impact*“ – Verbindungen im Kaffee angewandt. Zumal sich *Arabica* und *Robusta* nicht nur im Geschmack deutlich unterscheiden, sondern auch durch charakteristische Schlüsselaromen differenziert werden können. Dies spielt eine wichtige Rolle, da man bei *Robusta*-Sorten von minderwertiger Qualität spricht und diese oft in Kaffeemischungen zur „Streckung“ der *Arabica*-Qualitäten beimengt. Ebenso wurde die Aromaentfaltung von der grünen Rohbohne zum Röstkaffee mittels genannter Methodik erfasst. Der Frage, was die Aromaentwicklung im Kaffeetränk – die Rolle der Auf- und Zubereitung des Kaffees beeinflusst, wurde in diese Arbeit, die sich auch mit der differentiellen Aromastoffentwicklung zwischen nasser und trockener Aufbereitung befasst, ebenfalls nachgegangen.

## KAPITEL II

### 2. LITERATURÜBERSICHT

#### 2.1. Kaffee – Definition

Nach der Anlage Nr. 1 i.V.m. §§ 1 und 2 der Kaffeeverordnung vom 15. November 2001 wird der von der Fruchtschale komplett und von der Samenschale („Silberhaut“) nach Möglichkeit befreite, ungeröstete Samen von Pflanzen der Gattung *Coffea* als Rohkaffee bezeichnet. Röstkaffee in ungemahlener oder gemahlener Form darf einen maximalen Wassergehalt von 5% nicht überschreiten. Aus Röstkaffee wird durch verschiedene Extraktionsverfahren mit heißem Wasser jenes Kaffeegetränk gewonnen, das man als Kaffee bezeichnet [BELITZ et al., 2008].

#### 2.2. Kaffeebaum

In der Gattung *Coffea* sind mehrjährige Sträucher und Bäume vertreten. Sie gehören zur Pflanzenfamilie der *Rubiaceae* (Rötegewächse) und bestehen aus circa 70 Arten.

Von wirtschaftlicher Bedeutung sind nur zwei Kaffee-Varietäten. An erster Stelle ist *Coffea arabica* zu nennen, auf die 75% der Weltkaffeeproduktion anfallen. *Coffea canephora* var. *robusta* mit rund 25% nimmt den zweiten Platz in der Weltkaffee-Erzeugung ein. Zu nennen sind noch *C. liberica* und *C. excelsa*, die mit einem Anteil von < 1% eine geringe Bedeutung haben [BELITZ et al., 2008].

Die Kaffeepflanze erreicht eine Höhe von etwa 4 Meter, wird jedoch auf den Kaffeeplantagen strauchförmig auf einer Höhe von 1.50 bis 1.80 Metern gehalten, damit man die Früchte besser ernten kann. Es dauert in der Regel etwa acht Monate, bis sich aus einer Kaffeebohne ein Pflänzchen entwickelt, und drei Jahre, bis man erstmals ernten kann. Ein ausgewachsener Kaffeebaum trägt maximal zwischen fünf und acht Kilogramm Kaffeekirschen – aus diesen kann man ein bis zwei Kilogramm Bohnenkaffee gewinnen [EDELBAUER, 2003].

### 2.2.1. Wurzeln und Blätter

Die Wurzel ist pfahlartig ausgebildet und reicht ein bis zwei Meter in den Boden mit zahlreichen, nahe an der Oberfläche verlaufenden Nährwurzeln, die bis zu fünf Meter lang werden können. An den lang auslaufenden rutenförmigen Zweigen sitzen kurzstielige, immergrüne, länglich-ovale Laubblätter. Sie fühlen sich lederartig an und sind an der Oberseite dunkelgrün, an der Unterseite heller; sie sind 8 bis 15 cm lang und 4 bis 6 cm breit (siehe Abbildung 1) [EDELBAUER, 2003].

### 2.2.2. Blüte

Nach 3 bis 4 Jahren beginnt der Strauch zu blühen; seine fünfgliedrigen weißen Blüten (siehe Abbildung 1), die in Duft und Aussehen an Jasmin erinnern – sitzen zu Trugdolden gehäuft in den Blattachseln [EDELBAUER, 2003].



Abbildung 1

Kaffeeblätter, -kirschen und -blüten;  
Foto: [PAUZENBERGER, 2008]

### 2.2.3. Kaffeekirschen

Nach ihrer Befruchtung entwickeln sich in 7 bis 9 Monaten die ellipsenförmigen, zwei Samenkern enthaltenden, kirschenähnlichen Steinfrüchte mit 1.5 cm Durchmesser (siehe Abbildung 1). Die Farbe dieser so genannten „Kaffeekirschen“ wechselt während der Reifezeit von grün über gelb nach rot und im überreifen Zustand werden sie schwarz.

Die reife Frucht zeigt eine ledrige rote Kirschhaut (*Exokarp*), die ein weiches, gelbliches Fruchtfleisch, die Pulpe (*Mesokarp*), umhüllt. Das *Mesokarp* umschließt in der Regel die zwei mit ihrer abgeflachten Seite aneinander liegenden Steinkerne – die Kaffeebohnen. Sie sind mit einer Furche versehen und weisen mit den Rundungen nach außen. Jeder Same wird von einem dünnen, gelblich durchscheinenden und fest anhaftenden Silberhäutchen (*Testa* oder Samenhaut) eingehüllt. Die Pergamentschicht (*Endokarp* oder Hornschale), eine locker aufsitzende, hauchdünne Hülle umgibt schützend beide Bohnen. Oftmals findet sich in der Frucht nur ein einzelner Samenkern in Form einer rundlich-walzenförmigen Bohne, die im Handel als hochqualitativer *Perlkaffee* bezeichnet wird [EDELBAUER, 2003; BELITZ et al., 2008].

## 2.3. Standortansprüche der Kaffeepflanze

Für Wachstum und Ertrag der Kaffeepflanze sind Bodenbeschaffenheit, Höhenlage und Klimabedingungen entscheidend.

### 2.3.1. Bodenbeschaffenheit

Die Kaffeepflanze ist bezüglich Bodenqualität relativ niveauvoll. Für optimales Wachstum braucht der Kaffeestrauch lockeren tiefgründigen und gut belüfteten Boden, der zusätzlich reich an Humus sein soll. An organischen Stoffen sind Stickstoff, Phosphorsäure und Kalium für gutes Gedeihen notwendig.

Berühmt sind die tiefroten, humusreichen Verwitterungsböden des brasilianischen Staates *Sao Paulo*, die als *Terra roxa* (rote Erde) bezeichnet werden. Die Düngung erfolgt mit mineralischen Düngemitteln oder auch mit der bei der Aufbereitung anfallenden Kaffeepulpe [EDELBAUER, 2003].

### 2.3.2. Höhenlage

Für das Gedeihen des Kaffeebaumes sind mittlere tropische Höhenlagen besonders günstig. Kaffeeplantagen finden sich in Hochlagen zwischen 600 bis 1200 Metern, vielfach noch darüber. Seltener anzutreffen sind die Kulturen in Tiefländern und wenn, dann zumeist in Regionen, fernab vom Äquator [EDELBAUER, 2003].

### 2.3.3. Klimabedingungen

Zumal der Kaffeestrauch äußerst frostempfindlich ist, benötigt er Standorte mit mittleren Jahrestemperaturen zwischen 15 und 25°C. Beständig anhaltende Temperaturen unter 11°C können die Kaffeepflanze gefährden. In Trockenperioden müssen die Kulturen künstlich bewässert werden [EDELBAUER, 2003].

*Arabica*-Sorten sind hitzeempfindlicher und werden daher zwischen 600 und 2000 m Höhe in einer Region zwischen dem 23.° nördlicher und 25.° südlicher Breite angebaut. Die idealen Temperaturen liegen zwischen 18 und 22°C, die jährliche Niederschlagsmenge sollte zwischen 1000 und 1500 mm liegen. *Robusta*-Sorten benötigen mehr Hitze und Luftfeuchtigkeit und können daher nur bis zum 10. Breitengrad nördlich und südlich des Äquators bei durchschnittlich 25°C und jährliche Niederschlagsmengen um 2000 mm, jedoch auch im Flachland angebaut werden [EDELBAUER, 2008].

## 2.4. Kaffeeernte

Auf der nördlichen Halbkugel beginnt die Ernte etwa im Dezember und endet im Februar. Südlich des Äquators erfolgt sie etwa in den Monaten Mai bis August. Gewöhnlich gibt es eine Kaffeeernte im Jahr. Kaffeepflanzen bringen nach etwa drei Jahren die ersten Erträge und nach sechs bis acht Jahren erreichen sie ihre maximale Ausbeute. Viele Faktoren, wie beispielsweise Bodenerschöpfung, Pflanzenpflege, Baumgesundheit etc., tragen zum Produktionszyklus bei [DEUTSCHER KAFFEEVERBAND, 2004].

### 2.4.1. “Picking” und “Stripping”

Nur reife Kaffeebohnen entfalten später beim Röstvorgang das volle Aroma. Deshalb werden bei der „*Picking*-Methode“ lediglich die roten Kaffeekirschen geerntet. Ein Pflücker kann an einem Tag zwischen 60 und 100 Kilogramm ernten, die ungefähr 10 bis 20 kg Rohkaffee liefern. Diese Methode ist zwar sehr zeit- und arbeitsaufwändig, garantiert aber ein hohes Qualitätsniveau. Speziell für den *Arabica*-Kaffee, der nass aufbereitet wird, wird die *Picking*-Methode angewandt.

Eine weitere Methode ist die so genannte „*Strip*-Pflückung“. Hierbei wartet man solange bis die meisten Früchte reif sind und streift sie dann alle gemeinsam in einem Zug von den Zweigen. Die Früchte fallen dann in auf dem Boden ausgebreitete Tücher. Bei dieser Art zu ernten muss nachsortiert werden. Da aber meist nicht alle schadhaften Früchte erfolgreich aus der Ernte entfernt werden können, geht das schnellere „*Stripping*-Verfahren“ zu Lasten der Kaffeequalität [EDELBAUER, 2003].

## 2.4.2. Aufbereitung der Kaffeekirschen

So wie die Kaffeekirschen nach der Ernte vorliegen, sind sie weder für den Genuss geeignet, noch sind sie lager- und transportfähig. Um aus den Samen einen marktfähigen Kaffee herstellen zu können, muss die gesamte Ummantelung von der eigentlichen Kaffeebohne abgetrennt werden. Die beiden technologisch genutzten Wege, um diesen Zustand zu erreichen, sind die so genannte trockene und nasse Aufbereitung. Bei beiden Aufbereitungsprinzipien werden Fruchthaut, Fruchtfleisch und –schleim, Pergamenthaut und möglichst auch das Silberhäutchen, sowie der größte Teil des Wassers (von 50 bis 60% auf cirka 12%) entfernt, sodass am Ende die saubere und trockene Kaffeebohne übrig bleibt. Die so erhaltenen Rohbohnen sind transport- und lagerfähig [DEUTSCHER KAFFEEBERBAND, 2004]. Die Menge frischer Kaffeekirschen, die 1 kg Rohkaffee liefern (Rendement = Ausbeute) beträgt für *C. arabica* 6.38 kg, *C. canephora* 4.35 kg und *C. liberica* 11.5 kg [BELITZ et al., 2008].

### 2.4.2.1. Trockene Aufbereitung

Zumeist werden die Kaffeekirschen vor dem Trocknen durch schmale Kanäle geschwemmt. Dieser Arbeitsvorgang ist nötig, um grobe Verunreinigungen wie Steine, Blätter, Zweige, etc. zu entfernen. Anschließend kommen die Kaffeekirschen auf Trockenterrassen. Dort werden sie möglichst gleichmäßig ausgebreitet und der Luft bzw. Tropensonne zum Trocknen ausgesetzt. Die Früchte werden nachts angehäufelt und mit Planen bedeckt, um Wärmeverluste zu vermeiden. Morgens werden sie wieder ausgebreitet, um den Trocknungsprozess fortzusetzen. Die Früchte müssen ständig gewendet und bewegt werden, um ein Faulen zu verhindern.

Die Kaffeekirschen werden so lange getrocknet, bis der Samen beim Schütteln der Frucht in der Hülse „rappelt“, so lassen sich die in ihnen enthaltenen Bohnen rückstandslos herauschälen. Es dauert 6 bis 15 Tage, bis die Kaffeekirschen getrocknet sind und eine Restfeuchte von etwa 12% haben.



Im Anschluss folgt das Enthülsen. Dabei kommen die getrockneten Kirschen in eine Schälmaschine, z.B. in eine konische Schneckenwalze. Hier wird das getrocknete Fruchtfleisch aufgebrochen und durch Quetschen entfernt, ebenso die Pergamenthülle und so weit wie möglich auch das Silberhäutchen. Die losen Teile werden abgesaugt, die geschälten Früchte verlassen die Schälapparatur. Der geschälte Kaffee wird entweder von Hand oder mit mechanischen bzw. elektronischen Sortiermaschinen nach Größe, Dichte und Farbe verlesen und unter der Bezeichnung „*ungewaschener Kaffee*“ (*Dry*) in den Handel gebracht [BELITZ et al., 2008; EDELBAUER, 2008]. Der Vorgang ist in Abbildung 2 zusammengefasst dargestellt.

#### **2.4.2.2. Nasse Aufbereitung**

Die nasse Aufbereitung ist kostspieliger, moderner und vor allem bei hochwertigen Kaffeesorten üblich. Bei der nassen Aufbereitungsmethode kommen die reifen Kirschen in so genannte Quell tanks. Dort lässt man über Nacht das Fruchtfleisch aufquellen. Am darauf folgenden Tag werden die aufgeschwemmten Kaffee Früchte durch Schwemmkanäle, dem so genannten „Pulper“, zugeführt. Die Pulper arbeiten mit einem Walzensystem; Scheiben pressen die Kirschen gegen einen aufgerauten Zylinder, wobei das weiche Fruchtfleisch von den Bohnen abgequetscht wird, ohne diese zu beschädigen. Sie verlassen den Entpulper mit Silberhaut und Pergamenthülle sowie erhebliche Reste von Fruchtfleisch und scheinen von einer schleimigen Masse umgeben zu sein. Der entpulpte Kaffee wird im Schwemmkanal und durch Siebung weiter sortiert und in ein Fermentationsbecken geleitet. Danach werden die Fruchtfleischreste 12 bis 48 Stunden vergärt, wobei durch kaffeeeigene pektinolytische Enzyme, beziehungsweise auch unter Beteiligung von Mikroorganismen das Fruchtfleisch soweit gelockert und abgebaut wird, dass es im späteren Arbeitsschritt leicht entfernt werden kann. Die Fermentation wird unter Wasser durchgeführt, zumal die Gärung dadurch verlangsamt und somit gleichmäßig und besser regulierbar wird; dort lösen sich die letzten Fruchtschleimrückstände. Absolute Sauberkeit aller

Aufbereitungsanlagen ist notwendig, denn eine Bohne, die zu lange der Gärung ausgesetzt war, ist überfermentiert und ergibt die berüchtigte „Öl- oder *Stinkerbohne*“, die eine ganze Kaffeecharge verderben kann.

Nach dem Gärprozess muss der Kaffee gewaschen werden. In Reinigungsbecken werden die Bohnen unter ständigem Wasserzufluss von Fruchtfleischresten gesäubert. In dieser Verarbeitungsstufe sind die Bohnen also nur noch von der Hornschale, dem Pergamino, umgeben – man nennt ihn daher *Café in Pergamino*, *Pergament-*, *Hülsen-* oder *Hornschalenkaffee*.

Danach kommt die Trocknung des entfleischten Hülsenkaffees. Dies geschieht entweder in der Sonne auf Trockenplätzen (*Patios*) oder Trockenhorden und dauert etwa fünf Tage. Auf großen Plantagen werden die Bohnen vorgetrocknet und dann im Kaffeetrockner durch Heißluft bei 65 bis 85°C getrocknet. Diese Trocknung dauert nur noch wenige Stunden. Nachfolgend werden die *Pergaminos* in Schälmaschinen von der Pergamenthülle und dem Silberhäutchen befreit.

Der Rohkaffee ist nunmehr entfleischt, fermentiert, gewaschen und getrocknet; er kann in diesem Zustand exportiert werden. Die gewaschenen Kaffeesorten werden auch *milds* oder *Café lavado* genannt. Hochwertige Bohnen werden oft zur restlosen Entfernung der Silberhaut und zur Glättung der Oberfläche poliert [BELITZ et al., 2008; EDELBAUER, 2008]. Der Vorgang ist in Abbildung 2 zusammengefasst dargestellt.

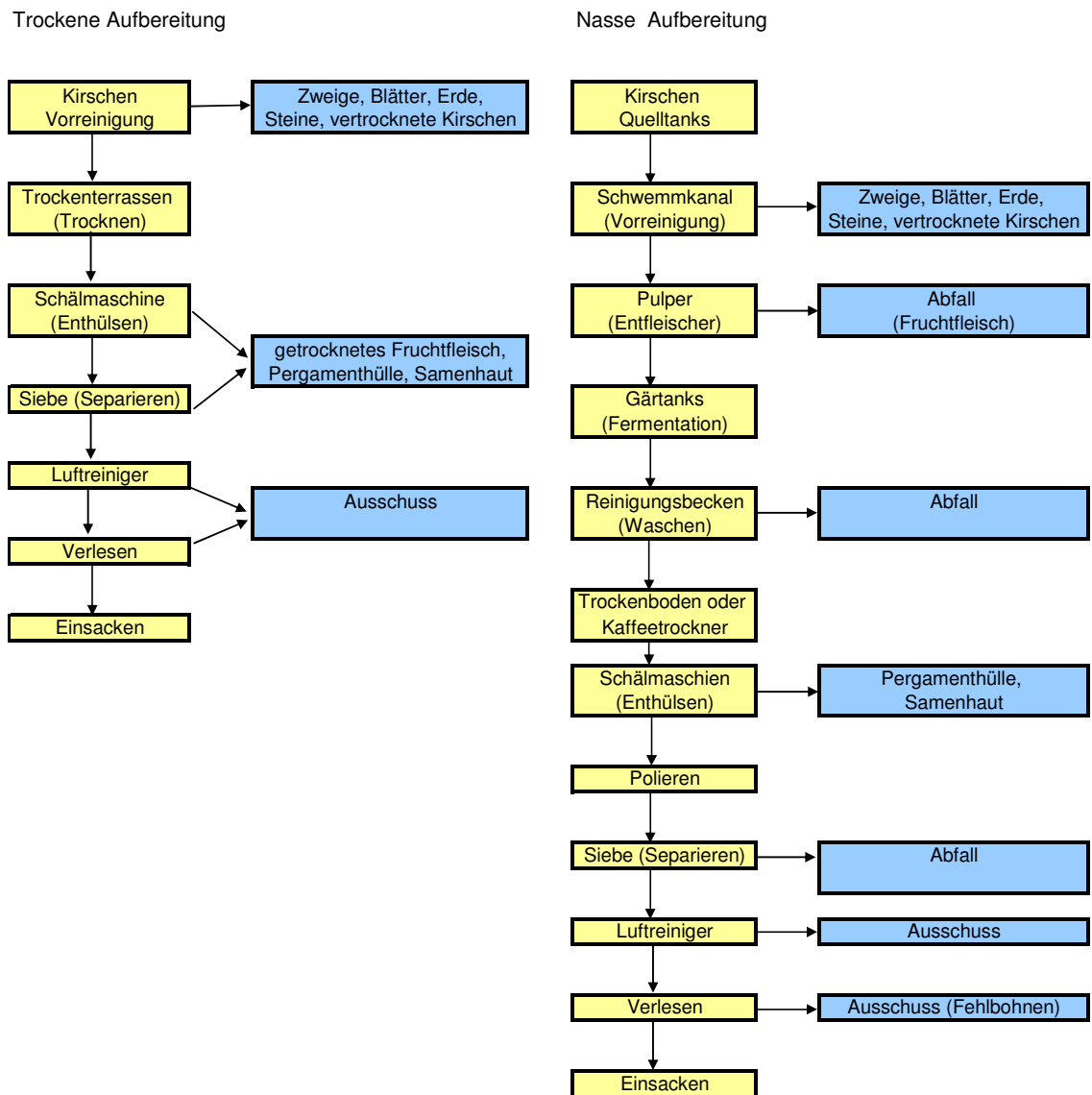


Abbildung 2 Schematische Darstellung des nass und trocken aufbereiteten Rohkaffees; Quelle: [EDELBAUER, 2003]

## 2.5. Rohkaffee

Bei *Coffea arabica* sind die relevantesten Varietäten *typica*, *bourbon*, *maragotype* und *mocca* und bei *Coffea canephora* die Varietäten *robusta*, *typica*, *uganda* und *quillon*. Alle *Coffea canephora* Varietäten sind als *Robusta* im Handel.

Gewöhnlich wird Rohkaffee nach seiner Herkunft oder dem Verschiffungshafen bezeichnet. Bedeutsame gewaschene *Arabicas* sind z.B. *Sidamo*, *Kenya*, *Tansania*, *Columbia*, *Salvador*, *Guatemala* und *Mexico*. Wichtige ungewaschene *Arabicas* sind der milde *Santos* und die harten *Rio* und *Bahia*, alle aus Brasilien. Meist ungewaschene *Robustas* sind beispielsweise *Angola*, *Uganda*, *Elfenbeinküste* sowie *Madagaskar*.

*Arabicas*, insbesondere solche aus Kenia, Kolumbien und Mittelamerika, haben eine „feine Säure“ und „gute Fülle“. Der brasilianische *Arabica Santos* ist infolge seines kräftigen aber weichen Geschmacks ein wichtiger Bestandteil von Röstkaffeemischungen. *Robustas* sind dagegen kräftiger, grober und herber im Aroma [BELITZ et al., 2008]. Die strenger riechenden *Robustas* werden den *Arabicas* unter anderem zur Intensivierung von erdig/phenolischen Aromanoten bei dunkel gerösteten Espresso-Kaffees beigemischt [GROSCH, 1996].

Trocken aufbereitete Kaffeebohnen erkennt man an der dunklen Furche in der Bohnenmitte, diese ist bei nass aufbereiteten Bohnen hell.

### 2.5.1. Zusammensetzung des Rohkaffees

Die Zusammensetzung von Rohkaffee ist von Sorte, Herkunft, Aufbereitung und von klimatischen Einflüssen abhängig. Nachfolgende Tabelle 1 gibt einen Überblick über die Differenzen bei *Arabica* und *Robusta*-Kaffee.

*Robustas* weisen einen erdigen, muffigen und herben Geschmack mit einem rauen und scharfen Abgang auf. Die signifikant höheren Gehalte von Chlorogensäure und Coffein tragen entscheidend zu diesem herben Geschmackseindruck bei. Hohe Konzentrationen an Chlorogensäure können zu Sodbrennen und Magenschmerzen führen. Übermäßig viel Coffein führt zu Unwohlsein, Muskelzittern, bis hin zu Schweißausbrüchen, Herzflattern und Schlaflosigkeit, erhöhtem Stoffwechsel und vermehrtem Harndrang [EDELBAUER, 2008].

*Arabica*-Sorten gelten im Allgemeinen als verträglicher, da sie weniger Chlorogensäure und Coffein beinhalten. Darüber hinaus sind die karamellartig

schmeckenden Substanzgruppen dominanter als bei den *Robustas* und machen den Geschmack des *Arabicas* „runder“ im Abgang.

Bis dato gibt es leider noch keine gesetzliche Auszeichnungspflicht für Kaffee, somit kann sich der Konsument nicht über den Inhalt der Kaffeepackung informieren [EDELBAUER, 2008].

Tabelle 1      Inhaltsstoffe von Rohkaffee (Arabica und Robusta <sup>1,2)</sup> )			
Bestandteil	Arabica	Robusta	Komponenten
<b>Lösliche Kohlenhydrate</b>	9,0 - 12,5	6,0 - 11,5	
Monosaccharide	0,2 - 0,5		Fructose, Glucose, Galactose, Arabinose (Spuren)
Oligosaccharide	6,0 - 9,0	3,0 - 7,0	Saccharose (>90%), Raffinose, Stachyose
Polysaccharide	3,0 - 4,0		Polymere aus Galactose (55-65%), Mannose (10-20%), Arabinose (20-35%), Glucose (<2%)
<b>unlösliche Kohlenhydrate</b>	46,0 - 53,0	34,0 - 44,0	
Hemicellulosen	5,0 - 10,0	3,0 - 4,0	Polymere aus Galactose (65-75%), Arabinose (25-30%), Mannose (0-10%)
Cellulose, β-(1-4)Mannan	41,0 - 43,0	32,0 - 40,0	
<b>Säuren und Phenole</b>			
Flüchtige Säuren	0,1		
Nichtflüchtige Säuren	2,0 - 2,9	1,3 - 2,2	Zitronen-, Äpfel-, Chinasäure
Chlorogensäure <sup>3</sup>	6,7 - 9,2	7,1 - 12,1	Mono-, Dicaffeoyl- und Feruloylchinasäure
Lignin	1,0 - 3,0		
<b>Lipide</b>	15,0 - 18,0	8,0 - 12,0	
Wachs	0,2 - 0,3		
Öl	7,7 - 17,7		Hauptfettsäuren: 16:0 und 18:2
<b>N-Verbindungen</b>	11,0 - 15,0		
Freie Aminosäuren	0,2 - 0,8		Haupt-AS: Glu, Asp, Asp-NH <sub>2</sub>
Proteine	8,5 - 12,0		
Coffein	0,8 - 1,4	1,7 - 4,0	Spuren von Theobromin und Theophyllin
Trigonellin	0,6 - 1,2	0,3 - 0,9	
<b>Mineralstoffe</b>	3,0 - 5,4		
<sup>1</sup> Werte in % Trockenmasse <sup>2</sup> Wassergehalt Rohkaffees: 7-13% <sup>3</sup> Hauptkomponente: 5-Caffeoylchinasäure (Chlorogensäure: <i>Arabica</i> 3,0 - 5,6%; <i>Robusta</i> 4,4 - 6,6%).			

Quelle: Tabelle modifiziert nach [BELITZ et al., 2008]

## 2.6. Röstung

Das Rösten ist das trockene Erhitzen der Kaffeebohnen, meist unter atmosphärischem Druck und im Temperaturbereich zwischen 100°C und 220°C. Es handelt sich gewissermaßen um eine trockene Destillation, bei der tiefgreifende Veränderungen vor sich gehen, die rein äußerlich durch Volumenzunahme, Struktur- und Farbveränderungen, Gewichtsverlust (Einbrand, 12 – 22%) und insbesondere durch Ausbildung eines typischen, der Rohbohne fehlenden Aromas gekennzeichnet sind. Der Röstprozess kann dabei in vier Hauptphasen eingeteilt werden: Trocknung, Entwicklung, Zersetzung und Vollröstung.

Zu Beginn, bei etwa 50°C zeigen sich erste Veränderungen der Gewebeschichten, dann gerinnt das Eiweiß und das in den Bohnen enthaltene Wasser verdampft auf unter 5% [BELITZ et al., 2008].

Nach dieser Trocknungsperiode erreicht die Temperatur über 100°C und es beginnt die trockene Destillation der organischen Substanzen. Der Fettgehalt der Bohnen nimmt etwas zu, während der im Rohkaffee enthaltene Zucker karamellisiert. Es tritt eine Bräunung der Bohnen durch Maillard-Reaktionen und die thermische Zersetzung organischer Substanzen, z.B. von Saccharose oder Monosacchariden, ein. Die Bohne verändert ihre Farbe während des Röstvorgangs von grün über gelb, gelbbraun und hellbraun bis hin zu dunkelbraun. Oberhalb von 150°C bilden sich gasförmige Produkte wie Wasserdampf und Kohlendioxid, die zu einer Volumenzunahme um 50 bis 100% führen.

Bei 180°C bis 200°C beginnt, infolge Sprengung der Bohnen, unter Krachen und Knacken die Zersetzungsphase, bei der bläulicher Rauch entweicht. Das charakteristische Kaffeearoma kann man jetzt erstmals riechen.

Anschließend wird unter optimaler Karamellbildung die Stufe der Vollröstung erreicht, wobei der Wassergehalt auf 1.5 bis 3.5% fällt. Karamellbildung und die Ausbildung des Kaffeearomas, an der eine Reihe chemischer Primär- und Sekundärreaktionen beteiligt sind, wie z.B. die *Maillard*-Reaktion, der *Strecker*-Abbau, der Abbau von Phenolsäuren, Lipiden

oder Thiamin, schließen den Röstprozess ab. Es entwickelt sich ein für jedes Rösten typischer Stoff, den man als „*Assamar*“ oder Röstbitter bezeichnet.

Die Führung des Röstvorgangs erfordert viel Übung und Routine, um einen gleichmäßigen Farbton und optimale Aromaentfaltung zu erzielen und Schädigung durch Überröstung und Anbrennen zu vermeiden. Man arbeitet unter anderem mit Zentrifugalröstern – das sind rotierende flache Schalen – Drehrohrröstern bzw. Wirbelschichtröstern (ca. 90% Konvektion). Die Kaffeeröstung kann im diskontinuierlichen oder kontinuierlichen Betrieb erfolgen. Die Wärmeübertragung bei der Röstung erfolgt durch Kontakt der Bohnen mit den Wänden der Röstapparatur (Kontaktröstung) bzw. durch heiße Luft oder Flammenabgase (Konvektionsröstung) unter ständiger Umwälzung des Röstgutes. Während des Röstens auftretende Dämpfe sowie Zellfragmente z.B. Silberhäutchen werden durch saugende *Exhaustoren* (Lüftungsanlagen) aufgefangen und entsorgt.

Die Dauer der Röstung ist dabei abgesehen von den gegebenen Eigenschaften des Rohkaffees und des gewünschten Röstgrades, von der Art der Wärmeübertragung, der Rösttemperatur und der Chargengröße abhängig und differiert zwischen 1.5 und 10 Minuten. Der Röstvorgang wird durch Probenziehen oder elektronisch kontrolliert und das fertig geröstete Produkt auf Kühlsiebe geleitet. Unter einem Kaltluftstrom, oft auch unter Wasserbenetzung herumgewirbelt und abgekühlt, um ein Nachrösten, Verbrennen oder Aromaverlust zu vermeiden. Der Einsatz von Wasser beschleunigt wohl den Kühlvorgang, mindert jedoch die Kaffeequalität, denn er steigert das Gewicht bei gleichzeitiger Verringerung der Ausbeute [EDELBAUER, 2003; BELITZ et al., 2008].

## **2.7. Herstellung des Kaffeegetränks**

Um ein aromatisches Kaffeegetränk mit hohem Gehalt an Geschmacks- und Aromastoffen zu gewinnen ist auch die Zubereitungsart entscheidend. Im Allgemeinen gibt es verschiedene Möglichkeiten, „Kaffee zu machen“. Beim

Türkischen Kaffee spricht man von Kochen, bei der Filtermethode sowie beim Espresso von Zubereiten. Aroma und Geschmack des Kaffeegetränks werden von vielfältigen Faktoren, wie nachfolgend beschrieben, beeinflusst [BELITZ et al., 2008].

## **2.8. Qualität des Kaffeegetränks**

Die Qualität der Bohnen hängt vom Klima und von der Bodenbeschaffenheit wie auch von der Erntetechnik im Anbaugebiet ab. Auch Aufbereitungsmethoden, Lagerbedingungen und Verschiffungsmodalitäten tragen zur Kaffeequalität bei. Bedeutungsvoll sind im Weiteren die Röstungsart und die Mischung verschiedener Sorten in den Verbraucherländern [EDELBAUER, 2003].

### **2.8.1. Zubereitungsmethode**

Kaffee lässt sich auf vielerlei Weise zubereiten. Die in Österreich gängigsten Methoden sind:

#### **2.8.1.1. Filterkaffeemaschine**

Bei dieser Filtermethode oder *Perkolation* (lateinisch: bedeutet filtern) wird das etwas körnig gemahlene Mahlgut auf einer filtrierenden Unterlage mit heißem Wasser extrahiert. Bei den meisten Kaffeemaschinen wird dieses Prinzip angewandt. Als Filterelemente werden meist, die erstmals im Jahre 1908 von der Hausfrau *Melitta Bentz* patentierten, Kaffeefilter aus Papier eingesetzt [EDELBAUER, 2003; BELITZ et al., 2008].



### **2.8.1.2. *Espressomaschine***

In der Espressomaschine wird in einem beheizten Kessel oder Wärmetauscher Wasser auf 82 °C bis 86 °C erhitzt und unter hohem Wasserdruck – etwa 9 Bar durch fein gemahlenes Espressomehl geleitet. Um zu verhindern, dass das Kaffeemehl in der Brühkammer aufgewirbelt wird und der Espresso dadurch zu schwach werden würde, wird das Kaffeepulver mit einem *Tamper* gepresst. Professionelle Espressomaschinen befinden sich heutzutage in fast allen Kaffeehäusern und haben weitgehend den Einsatz herkömmlicher Filterkaffeemaschinen abgelöst. In der Gastronomie finden sich hauptsächlich Voll- und Halbautomaten [EDELBAUER, 2003].

### **2.8.1.3. *Espressokanne***

Die Espressokanne, auch *Caffettiera* oder *Macchinetta* genannt, ist meist achteckig und aus einer Aluminiumlegierung hergestellt. Sie wird zum Kaffeekochen auf einem herkömmlichen Kochherd verwendet. Im Gegensatz zur Espressomaschine erreicht sie keinen so hohen Wasserdruck, im besten Falle 1.5 Bar. Deshalb bildet sich bei der Zubereitung in der Espressokanne keine oder nur eine leicht flüchtige *Crema*. Eine Espressokanne besteht aus drei Teilen. Den unteren Siedeteil befüllt man mit Wasser. Das Kaffeemehl wird in den Trichtereinsatz gegeben und das Kannenoberteil mit Steigrohr fängt den fertigen Espresso auf. Beim Erhitzen auf der Kochstelle beginnt das Wasser im Siedekessel zu kochen. Dadurch entsteht ein Überdruck – der Dampf steigt im Rohr nach oben, durchfließt dabei den Filter mit dem Espressopulver, kondensiert und sammelt sich als Espresso im Kannenoberteil, woraus er dann serviert werden kann [EDELBAUER, 2003].

### **2.8.1.4. *Türkischer Kaffee***

In der Türkei heißt das kleine Kupferkännchen mit dem langen hölzernen Stiel *Cezve*, in Griechenland ist er unter *Ibrik* oder *Briki* bekannt. Da der Kaffeesatz mit in die Tassen gefüllt wird, benötigt man dazu mehlfeinen Kaffee. Man füllt

zunächst Kaffeepulver und Zucker nach Belieben in das Kännchen, gießt kaltes Wasser darüber. Unter ständigem Rühren wird dreimal kurz aufgekocht. Sobald die Flüssigkeit Blasen wirft und der Kaffee sich gesetzt hat, nimmt man den Cezve vom Feuer und gibt ihn samt Satz in Tassen [EDELBAUER, 2008].

#### **2.8.1.5. Karlsbader-Kanne**

Eine sehr klassische, doch heute leider nur mehr selten anzutreffende Kaffee-Zubereitungsmethode. Der so zubereitete Kaffee übertrifft an Milde und Bekömmlichkeit jede andere Aufgussmethode. Die Karlsbader Porzellan-Kanne setzt sich aus vier Teilen zusammen, und zwar aus Kanne, Filteraufsatz, Wasserverteiler und Deckel. Die Mahlung für diese Zubereitungsart sollte körniger als jene für den Aufguss mit Papierfilter sein. Das Kaffeepulver wird in den auf der Kanne sitzenden Korpus eingefüllt. Das siedende Wasser gießt man in den Wasserverteiler, es tropft durch den Porzellanfilter und erreicht das Kaffeemehl. Anschließend sickert der Kaffeeaufguss in die darunter stehende Kanne und kann so auch serviert werden [EDELBAUER, 2008].



Abbildung 3 Karlsbader-Kanne;  
Foto: [PAUZENBERGER, 2008]

#### **2.8.2. Mahlgrad**

Die Mahlung sollte möglichst schonend erfolgen, das heißt, es sollte eine Methode gewählt werden, bei der keine zu große Wärme entsteht. Die Partikelgröße bestimmt, wie viel Oberfläche des Kaffees mit dem Brühwasser in Kontakt kommt. Für die Zubereitung eines guten aromatischen Kaffees ist darauf zu achten, dass der Kaffee die passende Mahlung für die jeweilige Zubereitungsmethode aufweist. Je länger die Zubereitungszeit, umso gröber darf der Mahlgrad sein. Durch feine Mahlung wird die Oberfläche vergrößert

und der Kaffee wird zu streng im Geschmack, da sich die Inhaltsstoffe schneller lösen. Wenn der Mahlgrad zu fein ist, intensiviert sich die Kontaktzeit und der Kaffee erhält einen bitteren Geschmack. Während bei grober Mahlung die Oberfläche verkleinert wird, ist nicht gewährleistet, dass alle Geschmacks- und Aromastoffe ausgenutzt werden können – ein zu dünner, leer schmeckender Kaffee entsteht [EDELBAUER, 2003; DEUTSCHER KAFFEEVERBAND, 2004].

### **2.8.3. Dosierung**

Die richtige Dosierung ist ein entscheidendes Kriterium für gelungenen Kaffee. Sie bestimmt die Stärke des Kaffees und ist damit für Geschmack und Bekömmlichkeit maßgebend. Als Größenordnung Teelöffel und Tassen anzugeben ist nicht exakt genug, deshalb gibt man die Menge in Gramm an. Für eine Tasse Kaffee empfiehlt es sich 6 bis 8 g Mahlgut pro Tasse mit 125 ml Inhalt zu verwenden [DEUTSCHER KAFFEEVERBAND, 2004].

### **2.8.4. Qualität des Wassers und pH-Wert**

Da ein Kaffeegetränk zu 98% aus Wasser besteht, ist eine einwandfreie Wasserqualität unerlässlich. Die im Wasser enthaltenen Salze und Mineralstoffe sind wichtige Geschmacksträger für das Aroma des Kaffeegetränks. Bei der Zubereitung von Kaffee immer frisches, kaltes Wasser verwenden, da abgestandenes oder zu lange warm gehaltenes Wasser sauerstoffarm ist. Am besten eignet sich Wasser mit 5 bis 7 °dH. Gut geeignetes Kaffeewasser soll mineralreich und sauerstoffhaltig sein. Zu weiches Wasser betont die Säure des Kaffees zu stark. Hingegen hartes, kalkhaltiges Wasser oder sehr viel Chlor im Kaffeewasser beeinträchtigt die Löslichkeit der Kaffeearomastoffe [EDELBAUER, 2003]. Auch der pH-Wert spielt für den Kaffeegeschmack eine entscheidende Rolle. Er sollte bei Verwendung von 42.5 g/l Kaffee mittlerer Röstung bei 4.9 bis 5.2 liegen. Bei pH < 4.9 schmeckt Kaffee

sauer, bei  $\text{pH} > 5.2$  eher flach und bitter. Generell ist der pH-Wert bei *Robusta*-Sorten höher als bei *Arabica*-Sorten [BELITZ et al., 2008].

### **2.8.5. Brühtemperatur und -zeit**

Die Temperatur des Wassers, welches mit dem das Mahlgut in Berührung kommt, sollte im Bereich zwischen 85 und 95°C liegen. Der Siedepunkt darf nicht überschritten werden, denn kochendes Wasser bringt die bitteren Komponenten des Kaffees stärker zur Geltung. Die Brühzeit hängt von der angewandten Zubereitungsart ab [EDELBAUER, 2008].

### **2.8.6. Standzeit des aufgebrühten Kaffees**

Der Kaffee sollte nur für den unmittelbaren Bedarf aufgebrüht und keinesfalls über 30 Minuten warm gehalten werden, da er sonst „umkippt“ und einen unannehmlichen Geschmack annimmt. Die Temperatur im Auslaufbehälter sollte thermostatgeregelt sein und 95°C keinesfalls überschreiten [EDELBAUER, 2003].

### **2.8.7. Aufbewahrung und Lagerung**

Röstkaffee sollte trocken und vor allem kühl gelagert werden. Bei Lagerung in einer Vorratsdose sollte der Kaffee mit der Packung in der Dose aufbewahrt werden, da einerseits das Umfüllen zu einem unnötigen Aromaverlust führt. Andererseits beinhaltet Kaffeemehl auch Wachse, Fette und ätherische Öle, die sich am Dosenrand absetzen und im Laufe der Zeit ranzig werden und das Kaffeearoma negativ beeinflussen. Da Kaffee – vor allem in gemahlener Form – eine große Oberflächenstruktur aufweist, nimmt er sehr schnell Fremdgerüche an. Daher sollte Kaffee grundsätzlich nicht in der Nähe geruchsintensiven Materials gelagert werden. Auch die Tiefkühlagerung ist für Röstkaffee sehr gut geeignet [EDELBAUER, 2003].

## 2.9. Inhaltsstoffe des Kaffeegetränks

Im Kaffeegetränk ändert sich die Zusammensetzung gegenüber der Röstbohne erheblich. Tabelle 1 (2.5.1) und die unten stehende Tabelle 2 geben Aufschluss über die Inhaltsstoffe. Die Trockenmasse des Kaffeegetränks liegt bei 1 bis 3% [BELITZ et al., 2008].

<i>Tabelle 2    Inhaltsstoffe eines Arabica-Kaffeegetränks<sup>1</sup>.</i>	
<b>Bestandteil</b>	<b>Masse in % Trockenmasse</b>
Protein <sup>2</sup>	6,0
Kohlenhydrate	24,0
Saccharose	0,8
Monosaccharide	0,4
Lipide	0,8
Flüchtige Säuren	1,4
Nichtflüchtige Säuren	1,6
Chlorogensäure	14,8
Coffein	4,8
Trigonellin	1,6
Nikotinsäure	0,08
<b>Flüchtige Aromastoffe</b>	0,4
Mineralstoffe	14,0
(Farbstoffe, Bitterstoffe etc.)	29,4
<sup>1</sup> mittlere Röstung, 50 g/l	
<sup>2</sup> berechnet als Summe der Aminosäuren nach Säurehydrolyse	

*Quelle: Tabelle modifiziert nach [BELITZ et al., 2008]*

## 2.10. Kaffeearomastoffe

Das Aroma ist ein ausschlaggebendes Qualitätskriterium eines Kaffees. Dies führte in Kombination mit der wirtschaftlichen Bedeutung dazu, dass Forscher schon seit mehr als 150 Jahren versuchen, die Strukturen der flüchtigen, für das Aroma verantwortlichen Verbindungen zu entschlüsseln [BELITZ et al., 2008]. Die einzelnen Kaffee-Varietäten unterscheiden sich signifikant in ihren

Aromaprofilen, was die Kaffee-Industrie durch Mischungen zum Erreichen des gewünschten Aromas nutzt.

### **2.10.1. Flüchtige Verbindungen und Aromastoffe im Rohkaffee**

Verglichen mit Röstkaffee ist die Zahl der bisher veröffentlichten Arbeiten über das Aroma von Rohkaffee sehr gering.

Die ersten Analysen zu diesem Thema wurden von *Rhoades* (1960) durchgeführt, er identifizierte 16 flüchtige Verbindungen in Rohkaffee, darunter Acetaldehyd, Propanal, Methylpropanal, 2-Methylbutanal, Methanthiol, Dimethylsulfid, 2,3-Butandion, Methanol und Ethanol [RHOADES, 1960].

*Holscher* und *Steinhart* (1995) wandten erstmalig die Kombination gaschromatographischer und olfaktorischer Analysen (HRGCO) zur Evaluierung potenter Aromastoffe des Rohkaffees unter den flüchtigen Verbindungen an. Die Autoren stellten dabei fest, dass wie in Tabelle 3 ersichtlich, elf Verbindungen eine besonders starke Geruchsintensität (3) aufwiesen [HOLSCHER und STEINHART, 1995].

Tabelle 3    Konzentrationen und Geruchsintensitäten flüchtiger Komponenten im Rohkaffee			
Verbindungen		Gehalte in µg/kg	Intensität <sup>1</sup>
1	Hexanal	775	1
2	Heptanal	104	0
3	2-Hexenal	20	0
4	1-Octen-3-on	10	1
5	2-Heptenal	75	0
6	3-Methyl-2-buten-1-ol	530	0
7	Nonanal	75	2
8	2-Octenal	75	0
9	3-Isopropyl-2-methoxypyrazin	<5	3
10	3-(Methylmercapto)-propionaldehyd	k.A.	3
11	1-Octen-3-ol	30	0
12	2,4-Heptadienal	20	0
13	Decanal	45	0
14	(Z)-2-Nonenal	8	3
15	Benzaldehyd	630	0
16	3-Isobutyl-2-methoxypyrazin	100	3
17	(E)-Nonenal	280	3
18	2,6-Dimethyl-2,7-octadien-6-ol	175	3
19	2,6-Nonadienal	10	3
20	Phenylacetaldehyd	445	3
21	2,4-Nonadienal-Isomer	<5	1
22	2-/3-Methylbuttersäure	3200	3
23	(E,E)-2,4-Nonadienal	35	2
24	(E,Z)-2,4-Nonadienal	20	1
25	(E,E)-2,4-Decadienal	105	3
26	β-Damascenon	90	3
<sup>1</sup> Geruchsintensität der Verbindungen bei der HRGCO (0: nicht wahrnehmbar; 1: schwach; 2: stark; 3: sehr stark). k.A. keine Angabe			

Quelle: Tabelle modifiziert nach [HOLSCHER und STEINHART, 1995]

Gleichzeitig bewerkstelligten *Holscher* und *Steinhart* (1995) mit ihrer Arbeit erstmals eine umfangreiche Quantifizierung von Aromastoffen im Rohkaffee. Folgedessen bestimmten sie die Gehalte von 26 Verbindungen in einem kolumbianischen Rohkaffee, unter denen sie zuvor über HRGCO 17

geruchsaktive Verbindungen detektiert hatten (siehe Tabelle 3) [HOLSCHER und STEINHART, 1995].

Zur Charakterisierung der wichtigsten Aromastoffe in Rohkaffee nutzten schließlich die Autoren *Czerny* und *Grosch* [CZERNY und GROSCH, 2000] die Aromaextraktverdünnungsanalyse (AEVA). Dieses Auswahlverfahren, eine so genannte *Screening*-Methode, weist auf diejenigen Inhaltsstoffe hin, die primär das Aroma eines Lebensmittels hervorrufen können, unabhängig vom Injektionsvolumen und der Konzentration der Aromastoffe im Extrakt [GROSCH, 1994]. Um solche aromarelevanten Verbindungen im Lebensmittel zu analysieren, müssen Aromaextrakte gewonnen werden. Die flüchtige Fraktion wird schrittweise mit einem Lösungsmittel verdünnt und jede Verdünnungsreihe gaschromatographisch und durch Abriechen des Trägergasstroms analysiert. Diesen Prozess (HRGCO) setzt man solange fort, bis keine geruchsaktiven Substanzen mehr wahrgenommen werden können [GROSCH, 1996]. Der höchste Verdünnungsfaktor, bei dem eine Verbindung wahrgenommen werden kann, wird als dessen Flavour Dilution (FD)-Faktor bezeichnet. Der unverdünnte Extrakt entspricht per Definition einem Verdünnungsfaktor von 1 [SCHIEBERLE und GROSCH, 1988].

Tabelle 4 fasst die von *Czerny* und *Grosch* (2000) auf diese Weise identifizierten Verbindungen mit hohen FD-Faktoren in Rohkaffee zusammen. Erstmals darunter 2-Methoxy-3,5-dimethylpyrazin, Sotolon und Ethylguajakol [CZERNY und GROSCH, 2000]. Als relevantesten Aromastoff stellten sie, ebenso wie *Holscher* und *Steinhart*, das erbsenartig riechende 3-Isobutyl-2-methoxypyrazin heraus.



Tabelle 4 Geruchspotente Aromastoffe im Rohkaffee

	Verbindung	FD-Faktor <sup>1</sup>	Geruchseindruck <sup>2</sup>
1	Hexanal	16	grün
2	(Z)-2-Nonenal	64	fettig, nach Karton
3	(E)-2-Nonenal	128	fettig, nach Karton
4	1-Octen-3-on	16	nach Pilz
5	Buttersäure	16	schweißig
6	2-/3-Methylbuttersäure	32	schweißig
7	Pentansäure	16	schweißig
8	2-Methylbuttersäureethylester	256	fruchtig
9	3-Methylbuttersäureethylester	256	fruchtig
10	3-(Methylmercapto)-propionaldehyd	64	nach gekochter Kartoffel
11	3-Isopropyl-2-methoxypyrazin	128	nach Erbse
12	2-Methoxy-3,5-dimethylpyrazin	512	erdig
13	3-Isobutyl-2-methoxypyrazin	4096	nach Erbse
14	2,6-Dimethyl-2,7-octadien-6-ol	16	blütig
15	Sotolon	64	würzig
16	Ethylguajakol	64	süß, phenolisch
17	Vinylguajakol	64	nach Nelke
18	Vanillin	128	nach Vanille

<sup>1</sup> Flavour Dilution (FD)-Faktor einer Verbindung (Verdünnungsfaktor)

<sup>2</sup> Geruchsbeschreibung bei der HRGCO

Quelle: Tabelle modifiziert nach [CZERNY und GROSCH, 2000]

## 2.10.2. Flüchtige Verbindungen und Aromastoffe im Röstkaffee

Bereits im 19. Jahrhundert wurden erste Untersuchungen zur Identifizierung flüchtiger Verbindungen aus Röstkaffee und Rohkaffee durchgeführt. Bereits 1880 konnte *Bernheimer* einige Aromakomponenten des Roh- und Röstkaffees nachweisen [BERNHEIMER, 1880].

Die eigentliche Kaffeearomaforschung begann jedoch in den Jahren 1921 bis 1930 mit den Arbeiten von *Reichstein* und *Staudinger*. Sie destillierten aus großen Mengen Kaffee die flüchtigen Verbindungen im Vakuum ab und gewannen durch rasche Kühlung des Dampfes auf  $-180^{\circ}\text{C}$  ein Kondensat, welches sie anschließend in Verbindungsklassen trennten [REICHSTEIN und STAUDINGER, 1925 und 1926]. Insgesamt identifizierten *Reichstein* und

*Staudinger* 70 Substanzen [STAUDINGER, 1968]. Davon waren 29 Substanzen bei Raumtemperatur flüchtig, unter anderem Acetaldehyd, 2-Methylbutanal, 2,3-Butandion, 2,3-Pentandion, Methanthiol, Dimethylsulfid, 2-Furfurylthiol, Guajakol, Vinylguajakol sowie einige Alkylpyrazine. Die Autoren stellten fest, dass nicht eine einzige Verbindung das Kaffeearoma hervorruft, aber dass der Geruch einer stark verdünnten wässrigen Lösung von 2-Furfurylthiol an den Geruch von Röstkaffee erinnerte. In späteren Arbeiten wurde dies bestätigt, allerdings kann das Kaffeearoma nicht allein über das röstige 2-Furfurylthiol erklärt werden [GROSCH, 1996].

Bei der ständig wachsenden Anzahl an identifizierten Aromastoffen im Kaffee kamen Zweifel auf, ob tatsächlich jede einzelne dieser Verbindungen am Kaffeearoma beteiligt ist. Man stellte fest, dass nicht alle flüchtigen Komponenten im Röstkaffee zum sensorisch wahrnehmbaren Aroma beitragen. Aus diesem Grund muss man zwischen aromaaktiven und aromainaktiven Verbindungen unterscheiden. Dabei wurde lange nach einer „character impact compound“, also einem Aromastoff gesucht, der das typische Kaffeearoma erklären kann. Respektiv scheint eine kleine Zahl von Aromastoffen („key aroma compounds“) in Kombination für das typische Kaffeearoma verantwortlich zu sein [SILWAR et al., 1987; BLANK et al., 1991].

Durch die Anwendung von Säulen hoher Trennleistung hat sich die Gaschromatographie gekoppelt mit anderen Analyseverfahren, beispielsweise der Massenspektrometrie (GC-MS), zu einer Methode entwickelt, mit der selbst komplexe Gemische separiert und deren Komponenten analysiert werden können. Entsprechend sind seit den 60er Jahren die Kenntnisse über die Zusammensetzung der flüchtigen Fraktion von Röstkaffee auf bis dato 835 gestiegen [NIJSSEN et al., 1996]. Es ist davon auszugehen, dass die Zahl der Aromastoffe im Röstkaffee noch ansteigen wird. Tabelle 5 fasst diese 835 Aromastoffe in Verbindungsklassen zusammen.

Tabelle 5 Einteilung der 835 Kaffeearomastoffe in Verbindungsklassen

Substanzklassen	Anzahl der Verbindungen	Substanzklassen	Anzahl der Verbindungen
Kohlenwasserstoffe <sup>1</sup>	45	Pyrazine	89
Kohlenwasserstoffe <sup>2</sup>	35	Chinoxaline	11
Alkohole	25	Furanone	128
Aldehyde	37	Oxazole	35
Ketone	85	Thiole	7
Säuren	28	Sulfide	13
Ester	33	Disulfide	10
Amine	13	Thiophene	28
Pyrrole	72	Thiazole	27
Pyridine	20	Phenole	49
		Sonstige	45

<sup>1</sup> aliphatische Kohlenwasserstoffe  
<sup>2</sup> aromatische Kohlenwasserstoffe

Quelle: Tabelle modifiziert nach [NIJSSEN et al., 1996]

Die flüchtige Fraktion des Röstkaffees ist sehr kompliziert zusammengesetzt. Es dominieren heterocyclische Verbindungen, wobei Furane mit 38-45% überwiegen, gefolgt von den Pyrazinen (25-30%), Pyridinen (3-7%) und Pyrrolen (2-3%) [GROSCH, 1996]. Kaffee zählt zu den aromareichsten Lebensmitteln – der Gesamtgehalt an flüchtigen Verbindungen wurde erstmals im Jahre 1987 mit circa 800 mg/kg Röstkaffee bestimmt [SILWAR et al., 1987].

Eine Reihe von Arbeitsgruppen befasste sich mit der Quantifizierung flüchtiger Verbindungen im Röstkaffee. *Semmelroch et al.* (1995) und *Semmelroch und Grosch* (1996) quantifizierten erstmals mit der Stabilisotopenverdünnungsanalyse 18 aromarelevante Verbindungen in *Arabica*- und *Robusta*-Kaffee, dies erläutert Tabelle 6. Die Autoren berechneten mit den gewonnenen quantitativen Daten die Aromawerte [SEMMELOCH et al., 1995; SEMMELOCH und GROSCH, 1996]. Dabei ist der Aromawert einer Verbindung definiert als Quotient ihrer Konzentration und ihrer Geruchsschwelle in einer bestimmten Matrix. Mit diesen kann die Aromarelevanz einzelner Verbindungen unter Berücksichtigung der Lebensmittelmatrix bewertet werden. Basierend nach dem Aromawertkonzept von *Rothe und Thomas* (1963) gilt, dass nur diejenigen Aromastoffe olfaktorisch wahrgenommen werden können,

bei denen der Aromawert größer gleich eins ist – diese leisten damit einen Beitrag zum Gesamtaroma [ROTHE und THOMAS, 1963].

Tabelle 6 Konzentrationen und Aromawerte geruchspotenter Aromastoffe in Arabica- und Robusta-Röstkaffee					
Verbindungen	Gehalt in µg/kg		Aromawert		Geruch
	Arabica <sup>1</sup>	Robusta <sup>2</sup>	Arabica <sup>1</sup>	Robusta <sup>2</sup>	
β-Damascenon	195	205	260.000	270.000	nach gekochtem Apfel
2-Furfurylthiol	1.080	1.730	110.000	170.000	nach Kaffee
3-Mercapto-3-methylbutylformiat	130	115	37.000	33.000	nach Katzenurin
3-Methyl-2-buten-1-thiol	8,2	8,3	27.300	27.700	schwefelig
3-Isobutyl-2-methoxypyrazin	83	12	16.600	2.400	nach Erbse
Ethylfuraneol	17.300	14.300	15.000	12.000	karamellartig
Furaneol	109.000	57.000	11.000	5.700	karamellartig
2,3-Butandion	50.800	47.800	3.390	3.190	nach Butter
Vinylguajakol	64.800	178.000	3.200	8.900	nach Nelke
Guajakol	4.200	28.200	1.700	11.000	phenolisch
2,3-Pentandion	39.600	19.800	1.320	660	nach Butter
3-(Methylmercapto)-propionaldehyd	235	95	1.200	500	nach gekochter Kartoffel
Vanillin	4.800	16.100	192	644	nach Vanille
2-Ethyl-3,5-dimethylpyrazin	330	940	165	470	erdig, röstig
2,3-Diethyl-5-methylpyrazin	95	310	95	310	erdig, röstig
Sotolon	1.470	630	74	32	würzig
Ethylguajakol	1.630	18.100	32	362	süß, phenolisch
Abhexon	160	85	21	11	würzig
<sup>1</sup> Coffea arabica					
<sup>2</sup> Coffea canephora var. Robusta					

Quelle: Tabelle modifiziert nach [SEMMELOCH et al., 1995; SEMMELOCH und GROSCH, 1996]

Semmelroch und Grosch haben anhand dieser Aromawerte folgende Schlüsselaromastoffe ermittelt: β-Damascenon, 2-Furfurylthiol, 3-Mercapto-3-methylbutylformiat und 3-Methyl-2-buten-1-thiol in Arabica- und Robusta-Sorten. Hingegen 3-Isobutyl-2-methoxypyrazin in Arabica-Kaffee und Guajakol in Robusta-Kaffee. Wesentlich höhere Gehalte an Pyrazinen und Phenolen –

sowie niedrigere Konzentrationen von Furanonen, 2,3-Pentandion und 3-(Methylmercapto)-propionaldehyd zeigten sich beim *Robusta*-Kaffee. Demzufolge rufen sie entsprechende Geruchsnoten im Aromaprofil von Kaffee hervor oder sind zum Mindesten daran beteiligt [SEMMEYROCH et al., 1995; SEMMEYROCH und GROSCH, 1996].

*Czerny et al.* (1999) ist es letztendlich gelungen, das Röstkaffee-Aroma anhand eines Aromamodells aus 28 Komponenten des gerösteten Kaffees zu simulieren und unter Zuhilfenahme von sensorischen Tests die Bedeutung der einzelnen „Aroma-Impact“-Verbindungen für das Gesamtroma zu bestimmen. Aufgrund der sensorischen Experimente wurden hauptsächlich 2-Furfurylthiol, Vinylguajakol, einige Alkylpyrazine, Furanone, Acetaldehyd, Propanal und die „malzig“ riechenden *Strecker*aldehyde als Schlüsselaromastoffe festgestellt, währenddessen andere Schwefelverbindungen wie z.B. 3-Methyl-2-buten-1-thiol und 3-Mercapto-3-methylbutylformiat nur einen geringen Einfluss hatten [CZERNY et al., 1999].

Im Jahr 2000 haben die Autoren *Czerny* und *Grosch* die Veränderung aromapotenter Verbindungen im Rohkaffee während des Röstens analysiert, diese sind in Tabelle 7 aufgelistet. Es zeigte sich, dass 3-(Methylmercapto)-propionaldehyd, Furanone und Phenole erst durch den Röstprozess gebildet werden, denn diese stiegen in ihren Konzentrationen stark an. Die Substanzklasse der Pyrazine zeigte sich als thermisch äußerst robust und änderte sich in ihrem Gehalt nur wenig. 3-Isobutyl-2-methoxypyrazin, das zum Gesamttröstroma potentiell beiträgt, wird durch die vielzähligen Kaffeeröststoffe „übertönt“ [CZERNY und GROSCH, 2000].

Tabelle 7 Konzentrationsvergleich ausgewählter Aromastoffe in Roh- und Röstkaffee derselben Sorte			
Substanzen		Gehalt in µg/kg <sup>1</sup>	
		Rohkaffee	Röstkaffee
1	2-Methylbuttersäureethylester	2,4	3,9
2	3-Methylbuttersäureethylester	22	14
3	3-(Methylmercapto)-propionaldehyd	22	213
4	2-Methoxy-3,5-dimethylpyrazin	0,5	1,1
5	3-Isopropyl-2-methoxypyrazin	2,3	2,4
6	Sotolon	0,7	1.870
7	(Z)-2-Nonenal	<0,3	<0,3
8	(E)-2-Nonenal	12	19
9	3-Isobutyl-2-methoxypyrazin	97	97
10	Ethylguajakol	21	4.060
11	Vinylguajakol	117	39.000
12	Vanillin	82	3.290
13	β-Damascenon	<0,3	255
<sup>1</sup> Mittlerer Röstgrad, <i>Coffea arabica</i> var. <i>tippica</i>			
Quelle: Tabelle modifiziert nach [CZERNY und GROSCH, 2000]			

Die Konzentrationen an phenolischen Verbindungen, z.B. Vinyl- oder Ethylguajakol sowie die Carbonylverbindung β-Damascenon und Vanillin nehmen während des Röstvorganges kontinuierlich zu.

### 2.10.3. Flüchtige Verbindungen und Aromastoffe im Kaffeegetränk

Ein großer Unterschied besteht zwischen dem Aroma des Röstkaffees und dem des daraus hergestellten Kaffeegetränk. Allerdings kommt es nicht zur Bildung neuer Aromastoffe, sondern es findet lediglich eine Verschiebung des Geruchseindrucks von schwefelig-röstig in eine mehr karamellartige-phenolische und butterartige Note statt [Mayer et al., 2000]. Das heißt, es kommt zu einer Konzentrationsverschiebung der vorhanden aromapotenten Verbindungen durch den Extraktionvorgang [SEMMELOCH und GROSCH, 1996].

Verglichen mit den Aromaextraktverdünnungsanalysen (AEVA) von Röstkaffee und dem daraus hergestellten Kaffeegetränk zeigte sich, dass im Kaffeegetränk die FD-Faktoren der Verbindungen Sotolon, Furaneol, Vanillin und 3-(Methylmercapto)-propionaldehyd explizit höher waren. Die FD-Faktoren der Verbindungen 2,3-Diethyl-5-methylpyrazin, 3-Isopropyl-2-methoxypyrazin, 3-Isobutyl-2-methoxypyrazin, 2-Methyl-3-furanthiol, 3-Mercapto-3-methylbutylformiat und 2-Furfurylthiol lagen deutlich niedriger [BLANK et al., 1992].

Sowohl *Semmelroch* und *Grosch* (1996) wie auch *Mayer et al.* (2000) bestätigten diese Resultate durch quantitative Daten und die Bestimmung der Extraktionsraten, die für polare Verbindungen, wie Furanone, Phenole, Acetaldehyd, 2,3-Butandion und 2,3-Pentandion sehr hoch (> 75%) und für relativ unpolare Substanzen wie Pyrazine,  $\beta$ -Damascenon oder das instabile 2-Furfurylthiol sehr niedrig (< 25%) waren. Tabelle 8 gibt einen Überblick über die Aromastoffe im Getränk und deren Ausbeute bei der Zubereitung [SEMMELOCH und GROSCH, 1996; MAYER et al., 2000]. Mit diesen 28 Aromastoffen in Konzentrationen, wie sie in einem Kaffeegetränk vorkommen, kann dessen Aroma weitgehend angenähert werden [BELITZ et al., 2008].

Tabelle 8    Konzentration geruchspotenter Aromastoffe im Arabica-Kaffee <sup>1</sup> und deren Ausbeute bei der Herstellung des Kaffeegetränks <sup>2</sup>		
Substanzgruppen/Aromastoffe	Konzentration (mg/kg)	Extraktions- ausbeute (%)
<b>süß/karamellartige Gruppe</b>		
1 Methylpropanal	28,2	59
2 2-Methylbutanal	23,4	62
3 3-Methylbutanal	17,8	62
4 2,3-Butandion	49,4	79
5 2,3-Pentandion	36,2	85
6 Furaneol	120	95
7 Ethylfuraneol	16,7	93
8 Vanillin	4,1	95
<b>erdige Gruppe</b>		
9 2-Ethyl-3,5-dimethylpyrazin	0,326	79
10 2-Ethenyl-3,5-dimethylpyrazin	0,053	35
11 2,3-Diethyl-5-methylpyrazin	0,09	67
12 2-Ethenyl-3-ethyl-5-methylpyrazin	0,017	25
13 3-Isobutyl-2-methoxypyrazin	0,087	23
<b>schwefelige/röstige Gruppe</b>		
14 2-Furfurylthiol	1,7	19
15 2-Methyl-3-furanthiol	0,064	34
16 Methional	0,239	74
17 3-Mercapto-3-methylbutylformiat	0,112	81
18 3-Methyl-2-buten-1-thiol	0,0099	85
19 Methanthiol	4,55	72
20 Dimethyltrisulfid	0,028	k.A.
<b>rauchig/phenolische Gruppe</b>		
21 Guajakol	3,2	65
22 Ethylguajakol	1,6	49
23 Vinylguajakol	55	30
<b>fruchtige Gruppe</b>		
24 Acetaldehyd	130	73
25 Propanal	17,4	k.A.
26 $\beta$ -Damascenon	0,226	11
<b>würzige Gruppe</b>		
27 Sotolon	1,58	78
28 Abhexon	0,132	k.A.
<sup>1</sup> mittlerer Röstgrad		
<sup>2</sup> Ausbeute der Aromastoffe bei der Herstellung des Getränks (1 l) durch Perkolation von Kaffeepulver (54 g) mit Wasser (ca. 90°C)		
k.A. nicht analysiert		

Quelle: Tabelle modifiziert nach [BELITZ et al., 2008]

Das Aromaprofil des Kaffees setzt sich, wie aus der oben angeführten Tabelle (Tabelle 8) ersichtlich, aus den Noten süß/karamellartig, erdig, schwefelig/röstig



und rauchig/phenolisch zusammen. Natürlich gibt es Konzentrationsunterschiede bei *Arabica*- und *Robusta*-Varietäten, die im nachfolgenden Kapitel behandelt werden. Die oben dargestellte Tabelle zeigt, dass die meisten Aromastoffe diesen Noten zugeordnet werden können. Die restlichen Aromastoffe riechen fruchtig bzw. würzig.

Anhand einiger Studien konnte bereits gezeigt werden, dass ein wichtiger Beitrag vom 2-Furfurylthiol ausgeht. Seine Vorläufer sind Polysaccharide, die Arabinose enthalten, z.B. Arabinogalactane, sowie Cystein. Ein beträchtlicher Anteil des 2-Furfurylthiols und der anderer Thiole, die in der Tabelle 8 angeführt sind, liegt im Röstkaffee als Disulfid gebunden an Cystein, SH-Peptide und Proteine vor. Die Bildung des 2-Furfurylthiols beim Röstvorgang wird durch den Wassergehalt und den leicht sauren pH-Wert der Bohnen begünstigt, da unter diesen Bedingungen die Arabinose in den Vorläufer-Polysacchariden durch partielle Hydrolyse freigesetzt wird [BELITZ et al., 2008].

#### **2.10.4. Flüchtige Verbindungen und Aromastoffe im Unterschied *Arabica*- und *Robusta*-Kaffeegetränk**

Die einzelnen Kaffee-Varietäten differenzieren sich signifikant in ihren Aromaprofilen, was die Kaffee-Industrie durch Mischungen zum Erreichen des gewünschten Aromas nutzt. Diese Unterschiede sind auf die variierende Zusammensetzung der einzelnen Kaffeesorten zurückzuführen.

Tabelle 9 zeigt die Schlüsselaromen, welche für die Sorten charakteristisch sind und *Robusta*- und *Arabica*-Varietäten durch höhere Konzentrationen das vorherrschende Aromaprofil verleihen. Demzufolge enthalten *Robustas* Alkylpyrazine und Phenole vor allem Guajakol und seine Abkömmlinge in signifikant höheren Konzentrationen als *Arabica*-Sorten [BELITZ et al., 2008].

<i>Tabelle 9</i> „Key Aroma Compounds“ für den Unterschied zwischen Arabica- und Robusta-Varietäten		
<b>Aromastoffe</b>	<b>Konzentration (mg/kg)</b>	
	<b><i>Arabica</i></b>	<b><i>Robusta</i></b>
2-Ethyl-3,5-dimethylpyrazin	0,326	0,94
2,3-Diethyl-5-methylpyrazin	0,09	0,31
Guajakol	3,2	28,2
Ethylguajakol	1,61	18,1
Vinylguajakol	55	178

*Quelle: Tabelle modifiziert nach [BELITZ et al., 2008]*

*Semmelroch* und *Grosch* gelang es in ihren Arbeiten, das Aroma des Kaffeegetränks unter Verwendung von 22 Verbindungen (siehe Tabelle 10), die sich im Getränk von *Arabica*- und *Robusta*-Kaffee als aromarelevant detektiert und deren Konzentrationen sie ermittelt hatten, in einem Aromamodell zu simulieren. Die Autoren deduzierten, dass das Aromaprofil des Kaffeegetränks insbesondere durch einige Alkylpyrazine, Furanone, Phenole, 3-(Methylmercapto)propionaldehyd, 3-Mercapto-3-methylbutylformiat und 2-Furfurylthiol bestimmt wird [SEMMELOCH und GROSCH, 1996].

Tabelle 10 Konzentrationen und Aromawerte von geruchspotenten Aromastoffe im Kaffeegetränk unterschiedlicher Arabica- und Robusta-Varietäten.						
	Aromastoffe	Konzentration <sup>1</sup>		Aromawert <sup>2</sup>		Geruchseindruck
		Arabica	Robusta	Arabica	Robusta	
1	2-Furfurylthiol	19,1	39	1.910	390	röstig, nach Kaffee
2	2-Ethyl-3,5-dimethylpyrazin	13,1	35,2	82	220	erdig, röstig
3	2,3-Diethyl-5-methylpyrazin	3,2	9,3	36	103	erdig, röstig
4	β-Damascenon	1,3	1,5	1.730	2.000	honigartig, nach gekochtem Apfel
5	Methional	5,7	2,8	29	14	rohe Kartoffeln, süßlich
6	3-Mercapto-3-methylbutylformiat	5,5	4,3	1.570	1.230	nach Katzenurin, röstig
7	Guajakol	170	1.230	68	490	phenolisch, würzig
8	Vinylguajakol	1.640	5.380	82	270	würzig, rauchig, nach Nelke
9	Ethylguajakol	51,0	635	1	13	würzig, süß, phenolisch
10	Vanillin	220	740	9	30	nach Vanille
11	Furaneol	4.510	2.480	450	250	karamellartig
12	Sotolon	77	31	257	103	würzig
13	Abhexon	8,7	4,4	1	<1	würzig
14	Ethylfuraneol	840	670	42	29	karamellartig
15	Diacetyl	2.750	2.400	183	160	nach Butter
16	2,3-Pentandion	1.570	750	52	25	nach Butter
17	2-Isobutyl-3-methoxypyrazin	1	0,2	200	34	erbsig
18	Propanal	435	435	44	44	fruchtig
19	Methylpropanal	800	1.380	1.140	1.970	malzig
20	2-Methylbutanal	650	1.300	500	1.000	malzig
21	3-Methylbutanal	550	925	1.570	2.640	malzig
22	Methanthiol	210	600	1.050	3.000	muffig

<sup>1</sup> Werte in µg/l im Kaffeegetränk

<sup>2</sup> Aromawerte wurden berechnet

Quelle: Tabelle modifiziert nach [SEMMELOCH und GROSCH, 1996]

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass *Arabica*-Kaffee sich über die Aromanoten karamellartig und süßlich beschreiben lassen, während in *Robustas* eher die Gruppe der würzigen und erdigen Aromastoffe überwiegen. So finden sich in *Robusta*-Sorten höhere Gehalte an phenolischen Aromastoffen, hervorgerufen durch seine im Vergleich zum *Arabica* höheren Konzentrationen an Chlorogensäure, speziell an Feruloyl-Chinasäuren, den

Prekursoren für Guajakol und seinen Abkömmlingen. Zudem dominieren die Aromanoten grün/erbsenartig im *Arabica*-Getränk sowie die butterartig riechenden Gruppen. Entsprechend intensiver sind die schwefeligen und rauchigen Noten im Aromaprofil des *Robusta*-Kaffeegetränks [SEMMELOCH und GROSCH, 1996].

### **2.10.5. Aromastoffe im Kaffeegetränk aus Röstkaffee verschiedener technologischer Aufbereitung**

Die genauen Ursachen oder die für den Unterschied verantwortlichen Aromakomponenten wurden bislang kaum untersucht. In einer Arbeit von *Teutsch* (2004) wurde dies anhand eines Kaffees durch sensorische Tests und analytische Verfahren unter anderem Aromaextraktverdünnungsanalyse (AEVA) und Headspaceverdünnungsanalyse (HVA) näher untersucht.

Bei der AEVA von nass aufbereitetem Röstkaffee (Peru, 2001) wurden 21 Substanzen mit hohen FD-Faktoren ( $\geq 32$ ) detektiert (vgl. Tabelle 11) unter denen  $\beta$ -Damascenon, Furaneol, 3-(Methylmercapto)-propionaldehyd und 2-Furfurylthiol die höchsten FD-Faktoren (1024) hatten. Im Weiteren spielten erdig/röstige Pyrazine (z.B. 2-Ethyl-3,5-dimethylpyrazin), würzige Furane (z.B. Sotolon), rauchig/phenolische und nelkenartige Phenole (z.B. Guajakol, Vinylguajakol) und schwefelige Verbindungen (3-Methyl-2-buten-1-thiol) eine bedeutende Rolle. Ergänzt durch die schweißige 2- und 3- Methylbuttersäure, sowie im schwächeren Maße die zwei nach Butter riechenden Diketone 2,3-Butandion und 2,3-Pentandion.

Auch im Kaffeegetränk aus trocken aufbereitetem Röstkaffee wurden alle diese bereits genannten Verbindungen mit nahezu gleichen FD-Faktoren detektiert. Abweichungen betrugen dabei höchstens eine Verdünnungsstufe. Hinzu kamen noch die fruchtig riechenden Ester 2- und 3-Methylbuttersäureethylester mit FD-Faktoren 32, die im Kaffeegetränk aus nass aufbereitetem Röstkaffee nicht gefunden wurden. Detektiert wurden auch mit malzigem Geruch die Aldehyde 2- und 3-Methylbutanal mit jeweils zwei Verdünnungsstufen höhere FD-Faktoren sowie Essigsäure [TEUTSCH, 2004].

Tabelle 11 Aromastoffe mit hohen FD-Faktoren ( $\geq 32$ ) im Kaffeegetränk (Peru 2001) nasser (na) und trockener (tr) Aufbereitung.				
	Verbindungen <sup>1</sup>	Geruchseindruck	FD-Faktoren na	tr
1	3-Methylbutanal	malzig	32	128
2	2-Methylbutanal	malzig	8	32
3	2,3-Butandion	nach Butter	256	256
4	2-Methylbuttersäureethylester	fruchtig	<1	32
5	2,3-Pentandion	nach Butter	64	64
6	3-Methylbuttersäureethylester	fruchtig	<1	32
7	3-Methyl-2-buten-1-thiol	schwefelig	256	256
8	2-Ethyl-3,5-dimethylpyrazin	erdig, röstig	512	512
9	2-Furfurylthiol	nach Kaffee	1024	1024
10	Essigsäure	nach Essig	32	64
11	3-(Methylmercapto)-propionaldehyd	nach gekochter Kartoffel	1024	1024
12	2,3-Diethyl-5-methylpyrazin	erdig, röstig	256	256
13	3-Isobutyl-2-methoxypyrazin	erbsig	512	512
14	2-Ethenyl-3,5-dimethylpyrazin	erdig, röstig	512	512
15	2-Ethenyl-3-ethyl-5-methylpyrazin	erdig, röstig	256	256
16	2-/3-Methylbuttersäure	schweißig	256	256
17	$\beta$ -Damascenon	nach gekochtem Apfel	1024	1024
18	Guajakol	phenolisch	512	512
19	Ethylguajakol	süß, phenolisch	128	256
20	Furaneol	karamellartig	1024	1024
21	Ethylfuraneol	karamellartig	512	512
22	Vinylguajakol	nach Nelke	256	256
23	Sotolon	würzig	512	512
24	Abhexon	würzig	256	256

<sup>1</sup> Die Verbindungen wurden vergleichend mit Referenzsubstanzen identifiziert

Quelle: Tabelle modifiziert nach [TEUTSCH, 2004]

Um mögliche Differenzen eines Kaffeegetränks zwischen gewaschen und ungewaschenen Röstkaffees hinsichtlich der leicht flüchtigen geruchsaktiven Substanzen festzustellen, die die AEVA nicht erfasste, wurde zusätzlich eine HVA durchgeführt. Im Vergleich zu der AEVA konnten bei der HVA weitere geruchspotente Verbindungen detektiert werden. Im Wesentlichen der fruchtig-stechende Acetaldehyd (FD-Faktor: 8) sowie das mit malzigem Geruch ausgestattete Methylpropanal (FD-Faktor: na 32; tr 64).

In der Arbeit von *Teutsch* hat man bei den ausgewählten Aromastoffen, bei welchen im Zuge vorangegangener Untersuchungen Unterschiede zwischen nass und trockener Aufbereitung im Getränk detektiert worden sind, eine Analyse mittels Isotopenverdünnungsanalyse (IVA) durchgeführt. Dabei stellte *Teutsch* fest, dass bei der Herstellung eines Kaffeegetränks aus trocken aufbereitetem Röstkaffee 30 bis 40% höhere Gehalte für 2- und 3-Methylbutanal und um den Faktor 10 bis 90 erhöhte Werte an Estern, die mit bis zu 4.6 µg/l Kaffeegetränk für 3-Methylbuttersäureethylester vorlagen. Die Extraktionsausbeute bei der Herstellung des Kaffeegetränks (1 l) aus Röstkaffeepulver (54 g) beträgt für die in Tabelle 11 gekennzeichnete Verbindung (1), 42%; für (2), 70% und für die beiden Ester (4 und 6) 47%.

Im Anblick aller vorliegenden Resultate konnte *Teutsch* zusammenfassend feststellen, dass ein Unterschied zwischen nass und trocken aufbereitetem Kaffee besteht, der in allen Verarbeitungsschritten des Kaffees, Rohkaffee, Röstkaffee und Kaffeegetränk merklich zu erkennen ist. Verursacht wurde dieser Unterschied in allen Fällen maßgeblich durch die fruchtig riechenden 2- und 3-Methylbuttersäureethylester, die bereits im trocken aufbereiteten Rohkaffee zu finden waren und bei der Röstung kaum abnahmen. Diese Verbindungen blieben in allen Stadien der Kaffeezubereitung aromapotent und bewirkten eine Verminderung der Aromaqualität gegenüber dem gewaschenen Kaffee, in dem die erwähnten Ester nicht detektiert werden konnten [TEUTSCH, 2004].

## **2.11. Das Klassische Kaffeehaus in Wien**

### **2.11.1. Der „Kaffeehausmarkt“ in Wien**

Da Kaffee weltweit getrunken wird, ist und bleibt die Kaffeehaus-tradition ein wesentlicher Teil des kulturellen und gesellschaftlichen Lebens in Österreich – ganz besonders in Wien. In Österreich gibt es nahezu 15.000 Kaffeehäuser bzw. so bezeichnete Buffets und Gaststätten, die in Kategorien eingeteilt werden können. So nahm die Wirtschaftskammer Österreich im zweiten Quartal 2008 eine Registrierung und Kategorisierung in Kaffeehäuser, Espresso, Kaffeerestaurants und Kaffee Konditoreien vor. In Wien bietet sich die Möglichkeit einer Erweiterung dieser Kategorien. Die Gesamtzahl aller aktiven Betriebe mit Gewerbe-konzession, die zu der Kaffeehaus-sparte zählen, beträgt für Wien 2.690. Diese unterteilen sich in 895 Kaffeehäuser, 794 Kaffeerestaurants, 779 Espresso, 191 Café-Konditoreien und 31 Stehcafés. Kaffeehäuser, Kaffeerestaurants und Café-Konditoreien haben anteilmäßig seit dem letzten Stichtag vom 31. Dezember 2002 deutlich zugenommen, dementsprechend hat der Anteil der Stehcafés und Espresso merklich abgenommen [WIRTSCHAFTSKAMMER WIEN, 2008].

### **2.11.2. Gründung der ersten Kaffeehäuser**

Das erste Kaffeehaus auf europäischen Boden wurde 1554 in Konstantinopel errichtet. Nach und nach wurden in vielen Städten Kaffeehäuser eröffnet: Am Markusplatz in Venedig im Jahre 1555, 1650 auch in Oxford, 1652 in London, ferner 1664 in Den Haag und 1671 in Marseille. 1672 gründete ein Armenier, namens *Pascal*, das erste Pariser Café. In Hamburg eröffnete im Jahr 1679 das erste Kaffeehaus – in Berlin erst Jahre danach (1721). Und je mehr Europäer

auf den Kaffeegeschmack kamen, umso heftiger bemühten sie sich, das Kaffeemonopol Südarabiens zu brechen. Die Eroberung der Welt war in vollem Gange und konnte nicht mehr aufgehalten werden [EDELBAUER, 2003].

### **2.11.3. Das „Wiener Kaffeehaus“**

Es gibt weltweit viele namentlich berühmte Kaffeehäuser, aber das „Wiener Kaffeehaus“ gilt als bedeutungsvolle und einzigartige Erscheinung. Touristen besuchen in Wien nicht nur die Staatsoper, den „Wurstelprater“ oder Schloss Schönbrunn, auch ein Besuch in einem typischen „Wiener Kaffeehaus“ steht in der Regel auf dem Besuchsprogramm. Das „Wiener Kaffeehaus“ repräsentiert für viele Touristen ein Stück Wiener Kulturgeschichte.

Wenn man gegenwärtig in Wien nach dem Gründervater des Wiener Kaffeehauses fragt, wird man weitgehend zur Antwort bekommen, dass es *Georg Franz Koltschitzky* war, der den Kaffee nach Wien gebracht und in Wien auch das erste Kaffeehaus im Jahr 1683 gegründet habe. Die Volksgeschichte hat die Entstehung des Kaffeehauses in Wien mit dem Mantel einer Legende umgeben. Dass diese keinesfalls der Wahrheit entspricht, wurde inzwischen längst durch wissenschaftliche Forschungsarbeiten verzeichnet [OPLL, 2006].

### **2.11.4. Begründer des Wiener Kaffeehauses**

In Wirklichkeit hat das Wiener Kaffeehaus drei Gründer – einen legendären und zwei historische. So paradox diese Formulierung klingt, sie ist es – laut dem Geschichtsprofessor *Karl Teply* – weniger als der ihr zugrunde liegende Sachhergang. Es ist nicht so, dass der historische Ablauf der Einbürgerung des Kaffees und in weiterer Folge das Aufkommen eines neuen Gewerbes von einer historischen Sage begleitet und ausgeschmückt wird, die Legende hat zur Gänze den Platz der historischen Wirklichkeit eingenommen [TEPLY, 1980].



#### **2.11.4.1. Georg Franz Koltschitzky – der legendäre Begründer des Wiener Kaffeehauses**

Die Legende besagt, dass der kühne Kundschafter *Georg Franz Koltschitzky* den Wienern das Geheimnis des „türkischen Kahve-Tranks“ enthüllt habe und noch im Jahr 1683, nach der Zweiten Türkenbelagerung, sein Kaffeehaus eröffnete.

*Koltschitzky* hat viele Meriten, Kaffeesieder ist er allerdings nie gewesen. Dies lässt sich sowohl aus der Recherche der *Koltschitzky*-Tradition als auch aus den zahlreichen zu seinem Leben erhaltenen Quellen mit Sicherheit begründen [TEPLY, 1980].

Bei der Zweiten Türkenbelagerung vom 14. Juli bis zum 12. September 1683 leistete der Orientwarenhändler *Koltschitzky* gefährliche Kurierdienste. Der türkischen Sprache mächtig und vertraut mit den Sitten und Bräuchen der Osmanen, schlich er verumt durch das feindliche Lager und erbrachte Dienste, die laut Sage zur Befreiung Wiens führten. Nach der Errettung in letzter Minute, fanden sich von den Türken zurückgelassene Säcke mit unbekannten grünen Bohnen. *Koltschitzky* kannte von früheren Kontakten zum Orient das Geheimnis der Bohnen. Er erbat sich als Belohnung für seine Dienste einige Säcke dieser merkwürdigen Bohnen. Außerdem erhielt er einen Freibrief und Geld zur Ausübung eines Gewerbes. Kaiser *Leopold I.* bewilligte *Koltschitzkys* Bitte und somit bekam er die Säcke mit dem erbeuteten Rohkaffee. Folglich fällt in das Jahr 1683, neben der erfolgreichen Verteidigung Wiens, auch die Gründung des ersten Wiener Kaffeehauses – soweit die Überlieferung. Als *Koltschitzky* als reicher Bürger am 16. Februar 1694 starb, trauerte ganz Wien um den prominenten Toten – soweit die Legende, die mit der Wirklichkeit allerdings wenig gemeinsam hat.

Tatsächlich starb er in tiefer Armut, angeblich vierundfünfzig Jahre alt. Sehr bald konnte man Illustrationen und Flugblätter sehen, die *Koltschitzky* als Kundschafter in türkischer Kleidung zeigten, bald folgten Bilder des „ersten Kaffeesieders“ sowie des *Koltschitzky'schen* Kaffeehauses „Zur blauen Flasche“ (heute: Wien 1, Stock-im-Eisen-Platz 6 und 7). Jene Bildnisse bewahrten *Koltschitzky* vor dem Vergessen [TEPLY, 1980; OPLL, 2006].

Wer war(en) nun der (die) eigentliche(n) Gründer des Wiener Kaffeehauses?

Die an *Koltschitzkys* Stelle gekommenen wahren Ahnherren der Wiener Kaffeesieder waren die Armenier *Johann Diodato* und *Isaak de Luca*.

#### **2.11.4.2. Johannes Diodato – Wiens erster hofbefreiter Kaffeesieder**

*Johannes Diodato*, *Deodat* oder *Theodat* genannt, war ein junger Handelsmann und Juwelier, der um 1640 in Istanbul geboren wurde und am 17. Mai 1725 in seinem Haus „Zum grünen Elefanten“ (heute: Wien 2, Hollandstraße 9) in Wien gestorben ist.

Schon 1654 war *Diodato* erstmals nach Wien gekommen, um 1666 ließ er sich endgültig in der Stadt nieder. Er handelte mit „orientalischen Waren“ sowie mit Ochsenhäuten, Lebendvieh, Teppichen, diversen Aromastoffen, Südfrüchten und Kaffee. Der Kaffeeimport war seinerzeit noch so gering, dass er in den spärlichen Mautlisten nicht als eigene Position erschien. Zur Zeit der Zweiten Türkenbelagerung lieferte *Diodato* des Öfteren Kriegsmaterial an die kaiserlichen Truppen. Rund zwei Jahre später, im Jahre 1685, erwarb *Diodato* einige Grundstücke „zu Nutz und Gewör“ im Wiener Vorort Leopoldstadt.

Am 17. Jänner 1685 erhielt er auf sein Ansuchen hin für zwei Jahrzehnte die Hoffreiheit, das „türkische Getränk als Caffé, The und Scherbet, zu praeparieren“. Mit diesem Ausschankprivileg, für *Diodato* als Pionier, beginnt in Wien die Geschichte des Wiener Kaffeehauses. Es sicherte *Diodato* das alleinige Recht, in Wien bzw. am Ort des kaiserlichen Hoflagers „solches orientalisches Getränkh auf 20 Jahr allein zu verkauffen, und sich dessen niemandt, er seye wher er wolle, bey Straff der confiscatio und 5 Markh Geldtes anmassen sollte“ [OPLL, 2006].

Dem Anschein nach befand sich das von *Diodato* eröffnete erste Kaffeehaus der Stadt Wien im selbigen Wohngebäude, dem „Hachenbergischen Haus“ (heute: Wien 1, Rotenturmstraße 14).

Fünf Jahre später, am 16. Juni 1690, erhielt Johannes *Diodato* das Wiener Bürgerrecht, gab aber damals aus steuertaktischen Gründen seine Hoffreiheit widerrechtlich nicht auf. Diese Tatsache verhinderte später bei

seiner Rückkehr aus Venedig seine Aufnahme in die Genossenschaft der bürgerlichen Kaffeesieder. In dem Jahrzehnt seiner Abwesenheit hatte *Diodato* sein Geschäft unter der Leitung seiner Ehefrau samt „Kaffeedienern“ weitergeführt.

Es schien, so *Teply*, dass *Diodato* mit seiner Kaffeeschank übersiedelt sei, denn das erste Hausverzeichnis Wiens zeigte, dass sich 1701 im „Schwanfelnerschen Haus“ auf dem Stephansplatz „das Cave Gewölb“ befunden habe [TEPLY, 1980; OPLL, 2006].

#### **2.11.4.3. Isaak de Luca – Wiens erster bürgerlicher Kaffeesieder**

Der zweite „Kaffeehausgründer“, neben *Diodato*, war ebenso ein armenischer Handelskaufmann, namens *Sahak Lucasian* oder *Lucas*, der sich in Wien *Isaak de Luca* nannte. Im Jahr 1697 tauchte er in Wien auf, heiratete und erwarb am 23. März desselben Jahres das Bürgerrecht. Ohne jemals sein Geschäft mit „Orientwaren“ aufzugeben, wandte er sich rasch der zukunftssträchtigen Kaffeesiederei zu und schon im September 1697 wird er als bürgerlicher Kaffeesieder bezeichnet. *De Luca* ist es auch gelungen, das Privileg *Diodatos*, das dieser während seiner Abwesenheit von Wien durch seine Frau aufrechterhielt, zu umgehen. Am 2. Dezember 1697 erhielt *de Luca* die Gewerbekonzession. Er war es, der nun rasch die Kaffeesiederei als bürgerliches Gewerbe in Wien etablierte.

Die frühen Kaffeesieder gerieten in Streit mit den so genannten „Wasserbrennern“, denen die Ausschank aller Spirituosen und sonstigen „Lustgetränken“ zustand. Unterstützung bei seinen Aktivitäten als bürgerlicher Kaffeesieder erhielt *Isaak de Luca* von *Andreas Pain* und *Philipp Rudolf Kämberg* (auch *Perg* genannt). Ausschließlich diese drei erhielten das Bürgerrecht „auf das „Cavesieden“, sowie das Recht allein „Theé, Cafféé, Schokolade und derlei Sorbeten“ ausschenken zu dürfen.

Den nunmehr drei bürgerlichen Kaffeesiedern gesellte sich 1699 *Leopold Rieß* als Vierter hinzu, an dessen Stelle später *Joseph Devich* (auch *Teppich*

geschrieben) trat. *Devich* und *Rieß* waren getaufte Türken, die anderen unter ihnen Armenier.

Das Kaffeesiederprivileg Kaiser *Leopolds I.* vom 16. Juli 1700 wollte die Konzessionserteilung auf diese vier Personen limitieren. Es sollte für jedes Stadtviertel nur ein bürgerliches Kaffeehaus zugelassen werden, was jedoch nicht gelang. Die nun in Gang geratene Entwicklung erwies sich als stärker. *Isaak de Lucas* erstes Kaffeehaus befand sich in der Salvatorgasse (heute: Wien 1, Salvatorgasse 2), 1703 übersiedelte er endgültig ins Haus „Zur blauen Flasche“. Von ihm ein Vierteljahrhundert und von seinen Nachkommen ein weiteres halbes Jahrhundert geführt, erschien es im Rückblick gegenüber den kurzlebigen frühen Kaffeehäusern als das schon immer da gewesene Urkaffeehaus. Die „Blaue Flasche“ blieb bis 1775 in Betrieb, immer in Familienbesitz. *Isaak de Luca* starb am 1. Februar 1729 in Istanbul [TEPLY, 1980; OPLL, 2006].

Die Gründerväter der Wiener Kaffeesiederei waren alle Armenier und Türken. Das Wiener Kaffeehaus ist demnach in seinen Wurzeln rein orientalischer Herkunft [TEPLY, 1980].

### **2.11.5. Das traditionelle Wiener Kaffeehaus – seine Anfänge und Verbreitung in Wien**

Bis 1714 gelang es noch weiteren sieben Anwärtern in das begehrte bürgerliche Kaffeegeerbe einzusteigen. Wie rasant sich in Wien die Kaffeehäuser verbreiteten, kann man daran ersehen, dass es 1737 bereits 37 bürgerliche Kaffeesieder gab. 1770 waren es bereits 48, im Jahr 1804 schon 89 und 1819 gab es schließlich 150 Kaffeesieder, hiervon waren 25 in der Innenstadt angesiedelt. Sukzessiv bildete sich auch in Wien, parallel zu Paris und London, eine für jede Stadt unverkennbare klassische Kaffeehauskultur heraus.

Abgesehen von zahlreichen, teilweise bis heute erhaltenen, traditionellen Unterschieden zwischen einer Gaststätte und einem Café gibt es noch immer –

im Gegensatz zu vielen anderen Ländern – eine eigene Innung der Kaffeesieder. Der unumgängliche Aufschwung dieses neuen Gewerbes hatte auf jeden Fall auch mit den Zeitumständen zu tun. Der Wegfall der Türkengefahr bewirkte eine Erweiterung der Vorstadtbezirke, eine starke Immigration neuer Bevölkerungsschichten veränderte die Sozialstruktur von Wien.

Die Kaffeehäuser Wiens waren in der Frühzeit meist finster, muffig und ohne jeglichen Komfort, dies änderte sich relativ schnell. Im fortschreitenden 18., besonders aber im 19. Jahrhundert boten eine Vielzahl der Cafés ihren Besuchern alles, was man mit „Luxus“ gleichsetzte. Es bildeten sich an berühmten Orten in der Stadt und Vorstadtbezirken regelrechte Kerngebiete von Kaffeehäusern.

Von Anfang an war ein Billardtisch fester Bestandteil des Kaffeehauses. Schon in der maria-theresianischen Epoche bot man seinen Kaffeehausgästen Zeitungen aus aller Welt als Lektüre an. Je größer die Anzahl der Zeitungen im jeweiligen Lokal, desto mehr Gelehrte, Professoren und Künstler fanden sich unter den Besuchern. Bereits im 18. Jahrhundert hielt auch die Musik Einzug ins Kaffeehaus. Ursprünglich herrschte in den Wiener Kaffeehäusern Rauchverbot, dies wurde allerdings 1780 aufgehoben.

Im Laufe der rund 325-jährigen Geschichte des Wiener Kaffeehauses kristallisierte sich während der Jahrzehnte und Jahrhunderte eine Vielzahl von ganz bestimmten „Kaffeehaustypen“ heraus. Bis zu den 50er Jahren des 19. Jahrhunderts waren Kaffeehäuser häufig Treffpunkte für Herrenrunden, die sich in den abgesonderten Spiel- und Rauchsalons dieser Lokale trafen. Im Vormärz bildeten sich vornehme *Garten-* und *Sommercafés*. Während der Biedermeierzeit entstand der Typus des *Ausflugscafés* (z.B. Café *Dommayer*; heute: Wien 13, Dommayergasse 1), das wegen seiner besonderen Lage oder malerischen Aussicht gerne besucht wurde. Die eleganten Kaffeehäuser der Ringstraßenzeit standen für das Großstädtische dieses Zeitalters. Sagenhafte Größe innerhalb der Kulturgeschichte Wiens erwarben die Literaten- und Intellektuellencafés (z.B. das *Central*, Wien 1, Herrengasse 14; *Sperl*, Wien 6, Gumpendorfer Straße 11-13). Im 19. und 20. Jahrhundert erfreuten sich immer

mehr Café-Konditoreien größter Beliebtheit. Nach dem Zweiten Weltkrieg wurde das Espresso immer populärer [OPLL, 2006].

### **2.11.6. Die Besonderheiten des traditionellen Wiener Kaffeehauses**

Die charakteristische Einrichtung eines klassischen Wiener Kaffeehauses bestand schon gegen Ende des 18. Jahrhunderts aus Spiegeln, Kristalllüstern, einem Billardtisch, einer großen Uhr und viel Porzellan, sowie echten oder falschen Marmortischchen. Am liebsten wurden sie in Eckhäusern eingerichtet mit guter Sicht auf die Straße. Der legendäre Thonet-Kaffeestuhl wurde erstmals Mitte des 19. Jahrhunderts geliefert [TEUFEL, 2004].

Beim Besuch eines Wiener Kaffeehauses will man neben dem Kaffeegenuss, in Ruhe Zeitung lesen, eine Partie Billard oder Schach spielen oder sich einfach nur gemütlich unterhalten. Die meisten Cafés bieten kleine Speisen an, wie zum Beispiel verschieden belegte Brote, ein Sortiment an Suppen sowie ein „Paarl“ Würstel oder Schinken-Käse-Toast. Die traditionellen Mehlspeisen, wie „Zwetschkenfleck“, das klassische Butterkipferl, mit Powidelmarmelade gefüllte Buchteln, Kardinalschnitten oder „Topfengolatsche“ sollten in keinem traditionellen Wiener Kaffeehaus fehlen.

Es ist eine Palette an Gewohnheiten, traditionellen Verhaltensweisen, die das „Flair“ des typischen Wiener Kaffeehauses und seine einzigartige Atmosphäre ausmachen. Das beginnt schon damit, dass man beim Kellner, der hier „Ober“ heißt, niemals einfach „einen Kaffee“ bestellen kann, ohne nicht sofort als unkundiger Kaffeehausbesucher entlarvt zu werden. Das berühmte Glas Wasser zum Kaffee, das Silbertablett und der Kaffeelöffel quer auf dem Wasserglas liegend werden von einem traditionellen Kaffeehaus erwartet [OPLL, 2006; MARTINEK, 1996]. Die Qual der Wahl zwischen den Kaffeespezialitäten ist nirgendwo größer als in Wien, dies zeigt eine kleine Auswahl klassischer Kaffee-Zubereitungsarten:

Mokka (Schwarzer): Beim kleinen Mokka oder „Piccolo“ spricht man von einem starken schwarzen Kaffee. Beim großen Mokka werden nur die doppelte Menge Kaffee und Wasser verwendet.

Wiener Melange: Der Kaffee wird mit Milch oder einer Mischung aus Obers und Milch versetzt. Bei der Bestellung im Kaffeehaus kann man Zusätze wie „mehr licht“ oder „mehr dunkel“, damit ist die Milchzufuhr gemeint, verwenden.

Kapuziner: Hier bekommt man einen starken Kaffee mit einer Haube aus Schlagobers gekrönt.

Wiener Einspänner: Der Ober serviert einen schwarzen Kaffee im Wasserglas mit Sahnehäubchen und mit Staubzucker bestreut.

Der Braune: Einfacher Kaffee mit Milch, die traditionellerweise im Kännchen serviert wird. Eine Abwandlung ist die „Schale Gold“, die noch lichter und goldiger als der Braune aufgetischt wird.

Fiaker: Es handelt sich hierbei um einen schwarzen Kaffee im Wasserglas. Eine weitere Variation ist der Fiaker mit Rum.

Verlängerter: Ein kleiner Schwarzer wird in eine große Tasse gegeben, dazu wird ein Kännchen heißes Wasser serviert, damit man seinen Kaffee nach Belieben „verlängern“ kann.

Der Obermayer: Hierbei wird ein kleiner oder großer Mokka serviert. Man süßt nach Geschmack und man lässt flüssiges Obers über einen umgedrehten Suppenlöffel langsam auf den Kaffee fließen.

Der gegenwärtig immer häufiger konsumierte Instant-Kaffee, die Kaffeeautomaten und Espresso-Bars haben eigentlich nichts mehr mit der exquisiten Inszenierung des Kaffeehauses im 17. und 18. Jahrhundert gemein, sind aber der Ausdruck einer neuen Fast Food Kultur, die in allen Bereichen der Ernährung Einzug gefunden hat [WALLPACH, 2003].

Im Rahmen dieser Arbeit wurden für das Projekt *WWTF* (Projekt Nr. C106-009 – fünf Sinne Call 2006) folgende Kaffeehäuser auf Gerüche und Aromen untersucht: Das *Café Ritter*, eine Filiale der Café-Konditorei *Aida* und das *Kleine Café*. Welche Atmosphäre in jenem Klassischen Wiener Kaffeehaus herrscht, wurde anhand eines Berichts zur Kenntnis genommen.

## 2.12. Traditionelle Wiener Kaffeehäuser – WWTF-Projekt

### 2.12.1. *Kleines Café* - Alternativ-Café mit kleinem Angebot

Franziskanerplatz 3, 1010 Wien

Montag bis Samstag 10 bis 2 Uhr, Sonntag 13 bis 2 Uhr



Abbildung 4 Innenräume des Kleinen Cafés; Foto: [PAUZENBERGER, 2008]

(a) Ausbau in Richtung Franziskanerplatz

(b) der ältere Raum mit Blick auf Bar

Der Schauspieler *Hanno Pöschl* fasste im Jahre 1970 den Beschluss, auf dem alten Franziskanerplatz, wo sich schon 1912 das Café des *Michael Schuh* befand, ein alternatives Kaffeehaus ins Leben zu rufen. Zu dieser Zeit waren Lokale wie dieses hier in Wien eher spärlich vorhanden. Anfänglich war es nur ein kleiner Raum um die Ecke, welchen der Wiener Architekt *Hermann Czech* in eine Stehbar abwandelte. Drei Jahre später wurde das Lokal Richtung Franziskanerplatz ausgebaut. *Czechs* Realisierung einer neuen, „stillen“



Architektur ist es zu verdanken, dass das *Kleine Café* heute lebendige Architekturgeschichte verkörpert [VEIGL, 1989].

#### **2.12.1.1. Einrichtung und Atmosphäre**

Das *Kleine Café* besteht heute aus zwei kleinen Räumen, die zusammengelegt worden sind und die folglich auch durch zwei Eingänge betreten werden können. Im ursprünglich älteren Raum, der die Größe eines kleinen Zimmers hat, befindet sich die Bar. Hier haben gerade mal zwei Tische Platz. Von dem niedrigen Kreuzgewölbe gelangt man über Stufen in den zweiten jüngeren Raum. Über den braunen Lederbänken sind Spiegel angebracht, darüber nackte Glühlampen, die ein behagliches, warmes Licht spenden [WURMDOBLER, 2005]. Die hellgelben Wände sind mit dunklem Holz verkleidet, die weißen Marmortischchen, die schwarzen Thonet-Stühle und die unterschiedlichen Fliesenstile geben dem *Kleinen Café* sein altherwürdiges Wiener Flair.

#### **2.12.1.2. Speisen und Getränke**

Für die mit einer Espressomaschine zubereiteten Kaffeespezialitäten wird ausschließlich brasilianischer *Arabica*-Kaffee der Firma *Julius Meinl – Arabia-Konsul-Diplomat*-Mischung – verwendet. Zum Namen passend gibt es hier ein eher kleines Kaffeesortiment. Es reicht vom Braunen, Schwarzen bis hin zur Wiener Melange sowie Verlängerter und auch die italienischen Varietäten Capuccino und Caffé Latte werden angeboten. Die Preise reichen von 1.90 bis 3.80 Euro. Als süße Kaffeebeilage kann der Gast zwischen dem berühmten Kipferl, Apfel- oder Topfenstrudel sowie Plundergebäck zu je 1.90 Euro wählen.

Reich ist die Auswahl an verschieden belegten Broten, die im Übrigen sehr groß sind und sich in der Preisklasse zwischen 1.90 und 4.80 Euro befinden. Die Variationen reichen vom schlichten Schnittlauchbrot, über Liptauer-, Gomasio-, Eiaufstrich-, Gemüse- sowie Schinken-Käse- und Thunfischbrot. Der Duft des frisch geschnittenen Gemüses, das auf die Brote

kommt, ist falls nicht allzu viel geraucht wird, sehr gut wahrnehmbar. Auch ein reichhaltiges Angebot an verschiedenen gemischten Salaten mit Schaf- oder Ziegenkäse wird dem Gast geboten. Unter den warmen Schmankerln findet man „Eierspeis“, Bauernomlette und heiße Würstel, die zwischen 4 und 5 Euro kosten. Täglich gibt es auch ein günstiges Mittagessen à la Wiener Küche.

### **2.12.1.3. Publikum**

Selbst in den beiden sehr kleinen Räumen lässt sich eine Soziologie der Architektur erkennen. Im ursprünglichen Teil des *Kleinen Cafés* findet man häufiger die ältere Generation. Im zweiten, bewusster gestalteten Raum sind zumeist jüngere Gäste zu finden [MARTINEK, 1996].

### 2.12.2. *Café Ritter* – Stadtcafé im Vorortbezirk

Ottakringer Straße 117, 1160 Wien

Montag bis Freitag 8 bis 1 Uhr, Samstag von 8 bis 24 Uhr und Sonntag  
von 14 bis 24 Uhr



Abbildung 5 Innenräume des *Café Ritter*; Foto: [PAUZENBERGER, 2008]

(a) Nichtraucher-Bereich und Bar

(b) typische Wanduhr vor großem Spiegel

Bevor *Wilhelm Ritter* 1905 das *Café Ritter* gegründet hat, hieß es *Café Merkur*. Das „Ritter“ ist das einzige verbleibende erwähnenswerte Kaffeehaus im Vorstadtbezirk Wien XVI, seitdem das *Café Alt Wien* vor einiger Zeit sperren musste. Das Lokal war und ist schon immer Versammlungsort vieler Vereine und Stammtische gewesen. Unzählige Preispokale in der Vitrine, profimäßige Wettbewerbslisten und vier Billardspieltische weisen unübersehbar darauf hin, dass hier der 1936 gegründete "Erste Ottakringer Billardclub" seinen Stammsitz hat [VEIGL, 1989]. Es gibt eine große Auswahl an Brettspielen, auch erfreut sich das populäre Kartenspiel „Schnapsen“ im *Café Ritter* großer Beliebtheit. Das Eckcafé ist der ideale Ort für nachmittägliche Kartenrunden und Schachpartien, umso mehr ist der Zigarettenqualm wahrnehmbar.

### **2.12.2.1. Einrichtung und Atmosphäre**

Das „Ritter“ ist aufgrund seiner Größe wohl eher ein Kaffeepalast. An den hohen hellgelben Wänden hängen riesige Ölgemälde. Ein starker Kontrast dazu sind der dunkle Bretterboden und die schwarzen Ledersitzbezüge. Die traditionellen Marmortische, die tabakbraunen Stuckdecken, die matten Kugellampen und die vielen Spiegel hinter einer großen Wanduhr verleihen dem *Café Ritter* eine behagliche und gemütliche Atmosphäre. Im Eingangsbereich drängt sich eine ellipsenförmig geschwungene Bar in den Raum. Dunkles Holz verkleidet die üppige Rundung des Tresens. Vorbei an der Bar, im hinteren Bereich, gelangt man in einen großen abgedunkelten Raum, in dem Billardtische stehen. Die gängigsten österreichischen Tageszeitungen werden in Holzgestellen für die Gäste bereitgestellt.

### **2.12.2.2. Speisen und Getränke**

Im *Café Ritter* erfolgt die Kaffeezubereitung mit einer Espressomaschine, täglich zwischen 8 und 11 Uhr erhält man auch Filterkaffee. Die Kaffeespezialitäten sind eher spärlich, sie reichen von Melange, über Brauner, Verlängerter und Schwarzer sowie die italienischen Abwandlungen von Milchkaffee – Caffé Latte und Kapuziner – Capuccino. Auf Anfrage erhält man vom Herrn Ober sogar einen Einspänner. Die Kaffeespezialitäten werden, so wie es in einem Wiener Kaffeehaus erwartet wird, auf einem Silbertablett mit Wasserglas serviert. Die Preise sind zwischen 1.90 und 3.10 Euro angelegt. Es werden verschiedenste Mehlspeisen, die sich in einer Vitrine befinden angeboten. Die Palette reicht von Fruchtschnitten über „Mohr im Hemd“ bis hin zum „Kaiserschmarrn“. Auch die klassische Kardinalschnitte, Sachertorte sowie diverse Strudeln sind meist im Glasschrank zu finden. Auf Wunsch bekommt man auch Palatschinken mit Marmelade oder Schokolade gefüllt serviert. Die Preise bewegen sich zwischen 2.30 und 4.70 Euro. Es gibt auch eine Vielzahl von warmen Speisen. Unter den Suppen gibt es die Klassiker: Frittaten-, Leberknödel- und Zwiebelsuppe zwischen 2.30 und 3.50 Euro. Bei den warmen Imbissen finden sich auch Würstel aller Art und eine Vielzahl an Toasts. Im

„Ritter“ werden auch diverse Schmankerl wie Schnitzel, Eiernockerl, Óevapčići und Putenspieße aufgetischt. Die Preise reichen von 3.80 bis 9.00 Euro. Bei den kalten Gerichten werden diverse Tramezzini und Salatplatten angepriesen.

#### **2.12.2.3. Publikum**

Die vielen Spieler machen das größte Kontingent der Stammgäste aus. Abwechslungsreiches Vorstadtpublikum trifft hier mit jungen, vielleicht einmal großen Intellektuellen zusammen [MARTINEK, 1996].

### 2.12.3. **Die AIDA – Café-Konditorei**

Wollzeile 28, 1010 Wien

Montag bis Freitag 6.30 bis 20 Uhr, Samstag 8 bis 20 Uhr und

Sonntag/Feiertag 10 bis 20 Uhr



Abbildung 6 Innenräume der Café-Konditorei Aida; Foto: [PAUZENBERGER, 2008]

(a) Aida-Filiale in der Wollzeile

(b) Blick auf Espressomaschine

Josef Prousek, der Begründer der Firma *Aida*, wurde am 25. Jänner 1883 in Nordböhmen geboren und erlernte nach Absolvierung der Pflichtschule den Zuckerbäckerberuf. Er arbeitete in verschiedenen europäischen Städten und gelangte schließlich nach Wien, wo er bei einer Feinbäckerei als Geselle arbeitete. Im Jahr 1912 heiratete er *Rosa Nerad* aus Bruck an der Leitha mit der er zwei Kinder, Hilde und Felix, bekam. Das Ehepaar kaufte 1917 die Konditorei *Bonsaing* in der Porzellangasse 47 im 9. Bezirk. Zur Umbenennung in „*Chocolaterie und Großkonditorei Aida Prousek & Co.*“ kam es 1925. Das Wohngebäude, die Backstube und das Geschäft in der Porzellangasse waren das Zentrum – somit auch Fabrik und Lager in einem, das die ständig expandierende Kette versorgte. 1934 wurde eine Gewerbesperre erteilt, davor öffnete *die Aida* etliche Verkaufsfilialen, von welchen nur der Betrieb in der Wollzeile als Café-Konditorei betrieben wurde. Vor Beginn des Zweiten Weltkriegs entstanden bereits 11 Filialen in Wien. Erst nach dem Krieg setzte

sich, im deutlichen Gegensatz zum gemütlichen traditionellen Wiener Kaffeehaus, der neuartige Stil des Espressos durch. Das Geschäft in der Wollzeile wurde im September 1948 wieder eröffnet und somit die erste Café-Konditorei Österreichs mit einer Espressomaschine. 1973 wurden Produktion und Verkauf getrennt und die „*Aida – ProduktionsgesmbH & Co. KG*“ gegründet. Im Sommer 1976 wurde die Produktionsstätte in der Schönthalergasse 1 im 21. Wiener Gemeindebezirk für die Erzeugung der Feingebäcke gegründet.

Von der Firma „*Aida-Prousek & Co.*“ sind im Jahr 2001 26 Filialen betrieben worden. Später wurde die Geschäftsführung vom Sohn des Gründers, *Felix Prousek* und dessen Sohn *Michael* wahrgenommen. Zwei Jahre später übernimmt der Enkel *Michael* die Alleinführung des Betriebs. Die 27. Filiale wurde 2004 in Großenzersdorf in Betrieb genommen [STADLER und THALER, 1995; AIDA, 2008]

Es ist interessant, dass keines der im Rahmen des *WWTF*-Projekts behandelten Kaffeehäuser, den Kaffee selbst thematisiert oder bestimmte Vorzüge des Getränks als Erkennungsfaktor betont hat. *Die Aida* stellt in dieser Hinsicht eine Sonderform dar, da sie vom Zeitfaktor der Gründung in den Bereich des Traditionellen fallen würde. Das Kaffeehaus sieht sich jedoch als Vorreiter der Fast-Food-Idee, als eine der ersten Ketten mit Espresso-Einschlag. Die Konditoreien der *Aida*-Kette sind heute eine feste Institution in Wien. Zwar werden die Feinbackwaren in Massenproduktion hergestellt, sind aber dennoch beim Wiener Publikum sehr beliebt.

### **2.12.3.1. Einrichtung und Atmosphäre**

Typische Elemente im *Aida* sind die dominierenden Farben Rosa und Braun, selbst die Kellnerinnen sind in diesen Farben gekleidet. Die verspiegelten Wände, vor denen sich die Glasflaschen, Pralinéschachteln und Torten zu multiplizieren scheinen, die dunkle Holztäfelung, die in diesem Fall auch äußerst elegant und schick den Raum verkleidet, machen das typische Flair in der *Aida*-Filiale aus. Charakteristisch ist auch der im Schachbrettmuster

angelegte Kunststoffboden, natürlich im Stil der 60er Jahre. Die Filiale in der Wollzeile hat allerdings noch den original braunen Parkettboden. Die schmalen Tische an den Wänden mit den weißen Kunststoffstühlen und zwei große Tische für den „Steh-Kaffee“ in der Raummitte geben dem Ganzen einen besonderen und zwanglosen Stil.

Es ist eine Mischung aus Unverbindlichkeit und Tradition, die sich hier so unverkennbar zu einer Institution fügt. *Die Aida* verkörpert den veränderten Espresso-Gedanken und zeigt, wie die Idee des schnellen Stehkaffees in Wien problemlos in Gemütlichkeit umschlagen kann. Dass es keine Zeitungen wie im Klassischen Kaffeehaus gibt, dass die Stühle und Hocker mit möglichst kleiner und harter Sitzfläche ausgestattet waren und sind, das scheint die Gäste nicht zu stören [STADLER und THALER, 1995].

### **2.12.3.2. Speisen und Getränke**

Seit 1958 importiert *Aida Arabica*-Bohnen aus Brasilien, Guatemala, Costa Rica und Nicaragua, diese werden zwei- bis dreimal wöchentlich in einem streng geheim gehaltenen Mischverhältnis in Wien mild geröstet [STADLER und THALER, 1995]. Die Zubereitung der erhältlichen Kaffeevarietäten erfolgt sowohl mit einem Espresso-Vollautomaten als auch mit der Filtermethode. Das Kaffeeangebot beinhaltet Capuccino, italienischen Caffé Latte und auch französischen Café au lait. Auch die traditionellen wienerischen Spezialitäten, wie Milchkaffee, *Aida Melange*, Einspanner, außerdem großer und kleiner Brauner/Schwarzer sind auf der rosafarbenen Getränkekarte zu finden. Auffallend ist, dass man seinen Kaffee in einer braunen Tasse aber trotzdem auf einem Silbertablett serviert bekommt. Wenn man andere *Aida*-Filialen, zum Beispiel jene am Stock-im-Eisen-Platz betrachtet, so ist das Mehlspeisen-Angebot ein eher spärliches, dennoch überdurchschnittlich groß. Es gibt eine ausgesprochen große Auswahl an diversen Torten und Schnitten, auch das Plundergebäck- und Strudel-Angebot ist beachtlich. Außerdem erhält man süße Pâtisserie schön verpackt im *Aida*-Design. Die Preise pro Stück pendeln sich zwischen 2 und 3 Euro ein. Als kleinen sauren Snack erhält man Schinken-



„Stangerl“, diverse belegte Brötchen oder Schinken-Käse-Toast im Kostenbereich von etwa 2 Euro.

### **2.12.3.3. Publikum**

*Die Aida* hat seit Beginn an eine eigene Linie vertreten, die beim Wiener Publikum bis heute sehr gut ankommt. Zum *Aida*-Publikum zählen sowohl Geschäftsleute als auch Pensionisten, Schüler und Studenten oder Handwerker. Da sich seit den frühen 50er Jahren merklich nicht viel geändert hat, spricht es vor allem die ältere Generation an, da es so manchen Gast in der Wollzeile-Filiale an die „gute alte“ Zeit erinnert.

## **2.13. Probenanreicherung – Solid Phase Microextraction (SPME, Festphasenmikroextraktion)**

### **2.13.1. Allgemeines**

Bei der Festphasenmikroextraktion handelt es sich um eine Adsorptions-/Desorptionstechnik, die ihren Einsatz zur Anreicherung von mehr oder weniger flüchtigen Verbindungen direkt aus wässrigen und gasförmigen Proben oder aus dem Dampfraum über wässrigen oder festen Proben findet [YANG und PEPPARD, 1994].

Die Methode ist eine einfache, leistungsfähige und innovative Extraktionsmethode. Sie zeichnet sich sowohl durch eine schnelle Durchführung sowie geringe Kosten in Anschaffung und Anwendung aus. Die SPME-„Sampling“-Methode erfordert keine Lösungsmittel oder schwierige Apparatur, zudem gibt es die Möglichkeit der Automatisierung [KOZIEL und INMAN, 2002; VAS und VÈKEY, 2004].

SPME integriert Probennahme durch Anreicherung der Analyten an eine mit Polymer beschichteten *Fused-Silica*-Faser (Extraktion), und anschließende thermische Desorption. Routinemäßig angewendet werden dabei Gaschromatographie (GC), Gaschromatographie in Kopplung mit Massenspektrometrie (GC-MS) oder Hochleistungs-Flüssig-Chromatographie (HPLC). Dabei werden Matrixprobleme und thermisch bedingte Veränderungen des Probenmaterials bei der Anreicherung weitgehend vermieden [GROTE und PAWLISZYN, 1997; VAS und VÈKEY, 2004].

### 2.13.2. Entwicklung der SPME

Im Jahre 1989 wurde die SPME-Methode von *Arthur* und *Pawliszyn* entwickelt, dabei waren Aromatische Kohlenwasserstoffe (BTEX) das erste Ziel der Untersuchungen [ARTHUR und PAWLISZYN, 1990].

Anfangs standen für die Festphasenmikroextraktion nur sehr wenige Beschichtungsmaterialien zur Verfügung. Die Fasern wurden mit Substanzen ummantelt, die gewöhnlich als stationäre Phase in der GC oder der HPLC dienten. Neben polaren Verbindungen wie Carbowax und Polyacrylat gehörten Octadecyltrichlorsilan und Polymethylvinylchlorsilan zu den Beschichtungsmaterialien [BELARDI und PAWLISZYN, 1989]. Später wurde Polydimethylsiloxan (PDMS) als Faserbeschichtung eingesetzt. Diese wird seit 1993 von der Firma *Supelco* (Bellefonte, PA) als erste kommerziell erhältliche SPME-Faser vertrieben [DEIBLER et al., 1999].

### 2.13.3. Anwendungsbereiche der SPME-Methode

Die Anwendungsmöglichkeiten der SPME sind vielseitig, vor allem in Kombination mit einer nachfolgenden gaschromatographischen Analyse ergeben sich breite Betätigungsfelder. Anfänglich wurde sie für Extraktion flüchtiger Verbindungen im Bereich des Umwelt- und Nahrungsmittelsektors eingesetzt [VAS und VÈKEY, 2004].

Die Festphasenmikroextraktion wird im Lebensmittelbereich vor allem bei Aroma- und Duftstoffanalysen von festen und flüssigen Proben angewandt. Hauptsächlich wird die SPME-Methode für Trinkwasseruntersuchungen, Pestizidnachweis, der Analyse von flüchtigen halogenierten Verbindungen, polyaromatischen Kohlenwasserstoffen oder polychlorierten Biphenylen eingesetzt. Des Weiteren findet die SPME in der pharmazeutischen Industrie, im forensischen Bereich sowie für physikochemische Untersuchungen ihre Anwendung [KOZIEL und INMAN, 2002]. SPME ist auch in der Analyse des Kaffees vielfach angewandt worden. Die Autoren *Yang* und *Peppard* (1994) setzten die Headspace-SPME als auch die direkte Anreicherung von

Aromastoffen in gemahlenem Espresso-Röstkaffee, in Fruchtsäften und pflanzlichen Ölen ein [YANG und PEPPARD, 1994]. *Akiyama et al.* (2008) beschrieben anhand dreier verschiedener Kaffeesorten, unter Verwendung der HS-SPME-Methode, Unterschiede der Aromazusammensetzung im Kaffeegetränk, welche mittels Filtermethode zubereitet wurden [AKIYAMA et al., 2008].

#### **2.13.4. Nachweisgrenzen der SPME**

Die Nachweisgrenzen bewegen sich in weiten Konzentrationsbereichen zwischen 0.01 ng/l (ppt) und 9 mg/l (ppm) – dies ist vor allem auf die unterschiedlich eingesetzten analytischen Systeme (Detektoren) zurückzuführen [BALTUSSEN et al., 2002].

#### **2.13.5. Aufbau der SPME-Faser/Faserhalter**

Die SPME-Apparatur ist ein sehr einfach gehaltenes Gerät, das äußerlich einer Injektionsspritze ähnelt. Kernstück der Festphasenmikroextraktion ist eine chemisch modifizierte 1 bis 2 cm lange Fused-Silica-Faser mit einem äußeren Durchmesser von meist 150 µm. Diese ist oberflächlich mit einer geeigneten Adsorbensschicht (Polydimethylsiloxan, Polyacrylat u.a.) von 5 bis 100 µm Stärke überzogen. Das meist verwendete Adsorbens ist das apolare Polydimethylsiloxan (PDMS). Die Analyte aus der Probe werden direkt auf der Faser-Schicht angereichert [BALTUSSEN et al., 2002].

Die Faser ist mit einem Kolben – einer Faserhalterung – verbunden und wird von einer Hohlneedle aus Stahl umgeben, diese kann während der Adsorption und Desorption heraus bzw. hinein geschoben werden. Die Faser kann, um die Handhabung zu erleichtern, mit Hilfe eines am Ende des Kolbens befindlichen Kunststoff-Gewindes in eine Faserhalterung eingeschraubt werden. Der Faserhalter schützt die beschichtete Faser und ermöglicht eine Kontrolle der Exposition der Faser während der Adsorptions- und

Desorptionsvorgänge. Abbildung 7 zeigt die schematische Darstellung einer SPME-Apparatur:

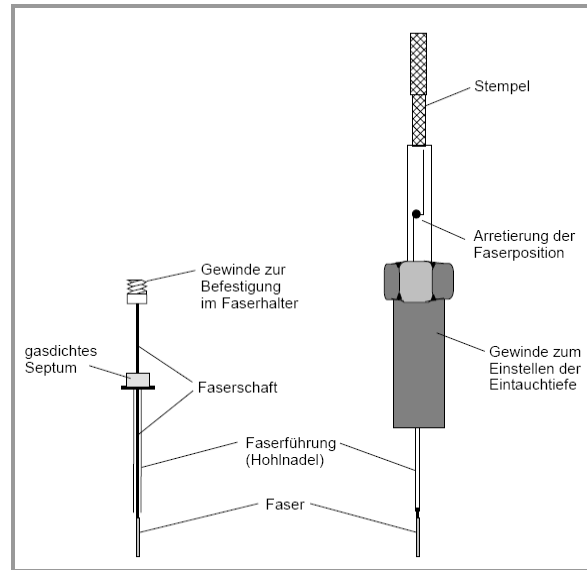


Abbildung 7      Schematische Darstellung: SPME-Faser und Faserhalter  
Quelle: [STIEN, 2001]

### 2.13.6. Prinzip der SPME-Methode

Es gibt zwei repräsentative SPME-Anwendungsmöglichkeiten; die Probenentnahme aus dem Dampfraum (HS, Headspace) und die Anreicherung aus wässrigen Lösungen (DI, Direct Immersion). Die Auswahl hängt hauptsächlich von der Polarität und Flüchtigkeit der Analyte ab. In beiden Fällen handelt es sich jedoch um eine Anreicherungstechnik, die sich gleichermaßen für die Analytik einer Vielzahl leichtflüchtiger wie auch mittel- und schwerflüchtiger Komponenten eignet [BALTUSSEN et al., 2002; VAS und VÈKEY, 2004].

### **2.13.6.1. Direkte Anreicherung aus wässrigen Lösungen (Direct Immersion, DI)**

Diese Methode ist gut geeignet für polare, schwerflüchtige Analyte, die durch direktes Eintauchen der Faser in das etwa 5 bis 10 ml Probenvolumen aus der Probe extrahiert werden. Die Analyten werden jedoch nicht vollständig aus der wässrigen Probe extrahiert, es stellt sich vielmehr ein Verteilungsgleichgewicht zwischen den in der wässrigen Probe gelösten und an der stationären Polymerphase adsorbierten Analytmoleküle ein. Die Haltbarkeit der Faserbeschichtung ist, im Vergleich zur Headspace-Methode kürzer – da es zum direkten Kontakt der Probe kommt [VAS und VÈKEY, 2004].

### **2.13.6.2. Anreicherung aus dem Dampfraum (Headspace, HS)**

Für leicht- und mittelflüchtige Verbindungen eignet sich die HS-SPME, bei der die Faser nicht in die Flüssigkeit eintaucht, sondern die Analyten aus der Gasphase oberhalb der Wasserprobe extrahiert werden. Vielfach eingesetzt wird die HS-SPME für die Analytik von Luft (z.B. Innenraumluft) [GROTE und PAWLISZYN, 1997; AKIYAMA et al., 2008]. Die HS-SPME ist immer dann vorzuziehen, wenn sich die Proben nicht für eine direkte Extraktion eignen. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde die HS-SPME in Verbindung mit der GC-MS eingesetzt.

Nach Abschluss des Extraktionsvorgangs im Dampfraum oder in wässriger Lösung wird die Faser wieder in die Nadel eingezogen. Man entfernt die Nadel vorsichtig aus dem Probengefäß (*Vial*) und führt sie direkt in den Injektor eines Gaschromatographen. Dort werden die Analyten thermisch von der Faser desorbiert und dem chromatographischen Prozess zugeführt. Abbildung 8 zeigt den generellen Ablauf der Durchführung von Analysen mittels SPME:

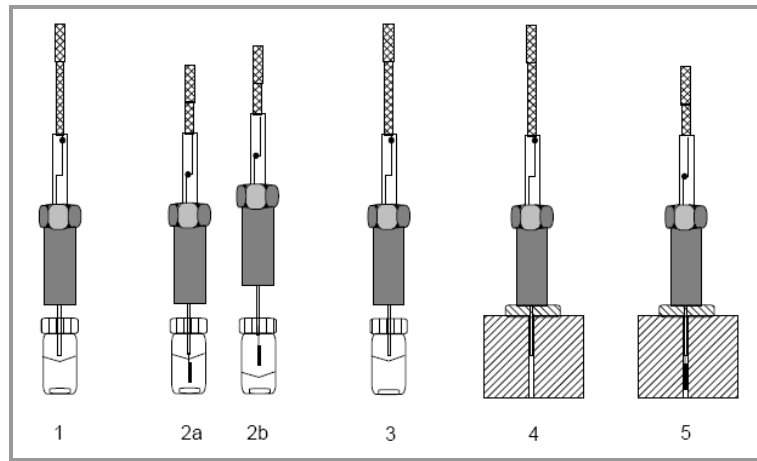


Abbildung 8 Schematische Darstellung einzelner Schritte bei der Durchführung von Analysen mittels SPME-Methode; Quelle: [STIEN, 2001]

#### Extraktion:

1. Das Septum des Vials der anzureichernden Probe wird mit der Hohlneedle durchstoßen.
2. a) Die Faser wird aus der Faserführung herausgefahren und in die wässrige Probe eingetaucht oder  
b) bei der Durchführung der HS-SPME dem Gasraum oberhalb der Probe ausgesetzt.
3. Nach der Extraktion wird die Faser wieder in die Faserführung „eingefahren“.

#### Desorption:

4. Die Faser wird in den Injektorblock eines Gaschromatographen überführt.
5. Nach dem „Ausfahren“ der SPME-Faser im temperaturprogrammierbaren Injektor erfolgt während der Heizphase die Thermodesorption der angereicherten Verbindungen.

Nach jeder Extraktion muss die SPME-Faser von Analytrückständen im heißen Injektorblock bei 230 bis 250 °C für 10 Minuten, gereinigt werden [BICCHI et al., 2002; AKIYAMA et al., 2008]. Entsprechend den Empfehlungen des Lieferanten

kann die SPME-Faser bei ordnungsgemäßer Handhabung 50 bis 100 Mal verwendet werden.

Obwohl die Festphasenmikroextraktion meist in Verbindung mit der Gaschromatographie verwendet wird, ist ihr Einsatz in Kombination mit der HPLC ebenso möglich. Nach der Extraktionsphase erfolgt allerdings keine Thermodesorption, dafür wird die Faser in eine wenige Mikroliter große Desorptionskammer eines speziell zu diesem Zweck konstruierten *Interfaces* eingebracht. Dieses ist über Kapillaren mit dem Fließmittel verbunden, welches die extrahierten Analyten von der Faser desorbiert und zur Trennsäule transportiert [KATAOKA et al., 2000].

## **2.14. Grundlagen der Gaschromatographie (GC)**

### **2.14.1. Definition**

Unter dem Begriff Chromatographie werden physikalische Methoden zusammengefasst, bei denen die Stofftrennung eines Gemisches durch Verteilung zwischen einer stationären und einer mobilen Phase erfolgt. Dabei stellt ein inertes Gas, das so genannte Trägergas, die mobile Phase dar, welches ein Rohr – in dem sich die stationäre Phase befindet – durchströmt. Als stationäre Phase kann ein Feststoff oder eine Flüssigkeit eingesetzt werden, an dem die zu trennenden Komponenten adsorbiert werden [SCHWEDT, 2007].

### **2.14.2. Schematischer Aufbau und Prinzip eines Gaschromatographen**

Ein GC-Gerät besteht aus einem Ofen (Heizthermostat), in dem sich die aufgespulte Trennsäule (Kolonne; 5) befindet. Am Probeneingabesystem oder Einspritzblock (4) beginnt die Trennsäule. An dieser Stelle wird einerseits das



Trärgas geleitet, andererseits auch die Substanzmischung durch Präzisionsinjektionsnadeln eingespritzt. Hierbei wird durch eine elastische Silikondichtung (Septum) gestochen, die sich beim Herausziehen der Nadel wieder schließt. Durch die hohe Temperatur des Einspritzblocks verdampft die zu analysierende Substanzmischung augenblicklich. Der Dampf wird durch das Trärgas in der thermostatisierten Trennsäule transportiert, wo der chromatographische Vorgang z.B. bei einer festgelegten Temperatur stattfindet. Anschließend passieren die in der Säule getrennten Substanzen nacheinander einen Detektor (6), der jeden einzelnen Bestandteil über ein Auswertsystem (7) aufzeichnet. Zur Steuerung der Trärgasversorgung (1) dienen sowohl ein Absperrventil, als auch ein Druckmessgerät (2) und Strömungsmesser (3). Die Module eines Gaschromatographen sind in Abbildung 9 schematisch dargestellt [OTTO, 2006].

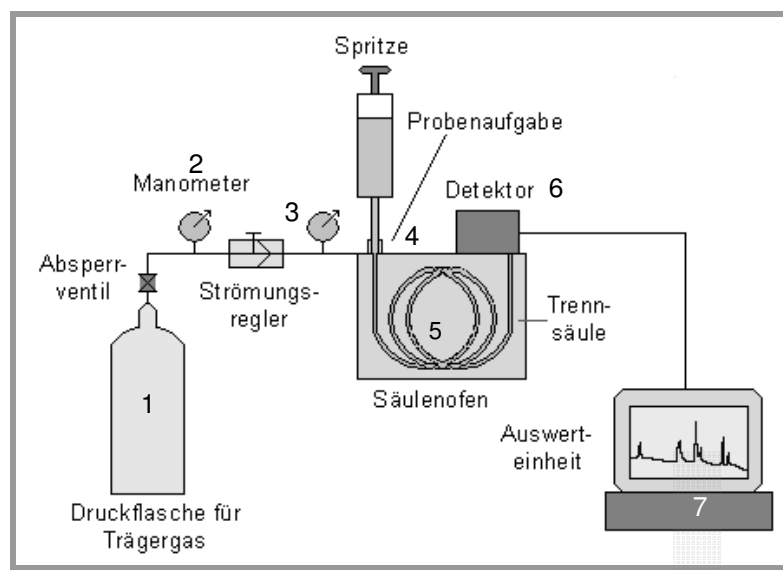


Abbildung 9 Prinzipieller Aufbau eines gaschromatographischen Systems

Quelle: [OTTO, 2006]

#### 2.14.2.1. Trärgase

Das Trärgas stellt in der Gaschromatographie die mobile Phase dar. Von dieser Phase wird gefordert, dass sie weder mit den zu trennenden Substanzen noch mit dem Trägermaterial reagiert. Aus diesem Grund finden vor allem inerte

Gase wie Helium, Argon, Stickstoff, Kohlendioxid und Wasserstoff Anwendung. Auch der optimal eingestellte Trägergasfluss ist wichtig zur Erreichung einer maximalen Trennleistung [HÜBSCHMANN, 1996; GERHARDS et al., 1997].

#### **2.14.2.2. Einspritzblock oder Probeninjektor**

Die Einbringung der Probe in das gaschromatographische System ist ein wichtiger Schritt bei der Analyse. Gasförmige Proben können direkt durch Einspritzen in das Analysesystem eingebracht werden. Flüssige Proben werden mithilfe einer Mikroliterspritze in den Gaschromatographen injiziert; feste Proben werden vorher aufgelöst.

Der Einspritzblock ist heizbar und verbindet den Trägergasfluss mit der Säule. Er ist nach außen hin mit dem Septum abgedichtet. Die Probe wird durch Einstich in das Septum am „Kopf“ der Säule in das System eingeführt. Die Injektionstemperatur muss so gewählt werden, dass es zur unverzügten Überführung in die Gasphase kommt – es entsteht ein Dampfropfen. Dazu werden Temperaturen von 200 °C bis über 300 °C eingesetzt. Man unterscheidet in Abhängigkeit vom teilweisen oder vollständigen Transfer der Lösemittel-/Probe-Anteile in das Trennsystem, die Betriebsweisen Split-Injektion und Totalaufgabe (splitlos). Bei der Totalaufgabe-Technik erfolgt die Dosierung, im Gegensatz zur Split-Injektion, in den heißen Injektor bei geschlossenem Split-Ventil. Splitlose Injektion wird meist bei Spurenanalysen angewendet [HÜBSCHMANN, 1996; GERHARDS et al., 1997; OTTO, 2006].

#### **2.14.2.3. Trennsäule**

Als Trennsäulen werden gepackte oder Kapillarsäulen verwendet. Die stationäre Phase einer gepackten Säule befindet sich in Rohren, meist aus Glas oder hochreinem Quarz (fused silica), mit einem Innendurchmesser von 3 bis 8 mm und Längen von 1 bis 3 m. Überwiegend werden Kapillarsäulen mit einem Innendurchmesser von 0.15 bis 1 mm und Längen bis zu 100 m, eingesetzt. Kapillarsäulen enthalten kein Trägermaterial. Die flüssige stationäre Phase ist

hier auf der Wand der Kapillare ausgebracht. Die gebräuchlichsten Längen für Standard-Kapillarsäulen in GC-MS-Systemen liegen bei 30 m oder 60 m. Zudem beeinflusst der innere Durchmesser einer Säule das Auflösungsvermögen und die Analysezeit eines Substanzgemisches [HÜBSCHMANN, 1996; SCHWEDT, 2007].

#### **2.14.2.4. Detektoren**

Nach der chromatographischen Trennung erfolgt die Detektion. Als universelle Detektoren haben sich in der Gaschromatographie der Wärmeleitfähigkeitsdetektor (WLD) und der Flammenionisationsdetektor (FID) erfolgreich bewährt. Allerdings wird immer häufiger der massenspektrometrische Detektor (GC-MS) verwendet, da er als verbindungsspezifischer Detektor auch Information über die Struktur und somit die Identität einer Verbindung liefert. Für die Identifikation von leichtflüchtigen Verbindungen ist die GC-MS-Kopplung die Methode der Wahl. Bei Luftanalysen muss eine außerordentlich hohe Anzahl von Komponenten verschiedenster Verbindungsklassen in einem sehr weiten Konzentrationsbereich berücksichtigt werden [HÜBSCHMANN, 1996; OTTO, 2006].

#### **2.14.3. Das Chromatogramm und seine Aussage**

Solange nur reines Trägergas aus der Säule in den Detektor gelangt, wird eine so genannte „Basisline“ aufgezeichnet. Sobald aber eluierte Komponenten mit dem Trägergas in den Detektor gelangen, werden diese als Gaußkurven – so genannte Peaks – registriert. Es wird für jede einzelne eluierte und getrennte Komponente ein Peak erhalten, die in Summe das Chromatogramm ergeben. Die Peaks liefern qualitative und quantitative Information über die analysierte Substanz:

Qualitativ: Die Retentionszeit ( $R_t$ ) einer Komponente ist bei gleich bleibender Versuchsanordnung stets konstant und eine charakteristische Größe für die betrachtende Substanz, sodass mittels GC qualitative Analysen von

Substanzgemischen möglich sind. Die Retentionszeit ist jene Zeit, die vom Einspritzen der Probe bis zum Erscheinen der Signalmaxima verstreicht. Die Zuordnung und Identifikation eines Peaks kann durch anschließenden Vergleich der Retentionszeiten mit einem Standard als Reinsubstanz geprüft werden.

Quantitativ: Die Höhe und Fläche des Peaks ist der eingespritzten Stoffmenge proportional, sodass auch quantitative Analysen möglich sind. Nicht bekannte Substanzmengen können durch Vergleich der Peakflächen und -höhen mit bekannten Konzentrationen verglichen und bestimmt werden. Die eluierenden Peaks haben im Idealfall die Form einer Glockenkurve [HÜBSCHMANN, 1996].

#### **2.14.4. Retentionsindizes nach Kovats**

Zur Darstellung von Retentionseigenschaften wurde anstelle der Retentionszeit der Retentionsindex (I) nach Kovats (1958) für die homologe Serie von n-Alkanen (n-Paraffinen) als Standardsubstanzen entwickelt. Er zeigt die relative Lage eines Substanz-Peaks in einem Chromatogramm an, wobei zwischen den Retentionszeiten der benachbarten n-Alkane interpoliert wird. Es besteht ein linearer Zusammenhang zwischen dem Logarithmus der reduzierten Retentionszeit und der Anzahl der Kohlenstoffatome in einer Verbindung. So ist der Retentionsindex einer Substanz gleich 100-mal der Kohlenstoffzahl eines hypothetischen n-Paraffins mit der gleichen reduzierten Retentionszeit wie die der interessierenden Substanz. Zur Ermittlung des Retentionsindex wird die zu untersuchende Substanz in einer Mischung chromatographiert, die mindestens zwei n-Alkane enthält. Der Retentionsindex ist stark von verschiedenen experimentellen Modalitäten, wie die Art der zu verteilenden Substanz, der Temperatur beim chromatographischen Prozess sowie der Art der stationären Phase abhängig [OTTO, 2006; SCHWEDT, 2007].

## 2.15. Grundlagen der Massenspektrometrie (MS)

Im Gegensatz zu anderen molekülspektroskopischen Praktiken – wie UV/VIS-, IR-, NMR-Spektroskopie – werden bei der Massenspektrometrie die aufgrund eines Ionisationsprozesses entstehenden Molekülionen bzw. Fragmente zur Analyse von Stoffen herangezogen. Die entstehenden Ionen werden adäquat ihrem Verhältnis Masse/Ladung ( $m/z$ ) in einem Analysator durch ein magnetisches oder elektrisches Feld aufgetrennt. Das Massenspektrum spiegelt die Auftrennung der Ionen wieder und gibt Aufklärung der Struktur von organischen Molekülen zudem die Bestimmung ihrer Molmasse. Aufgrund des hohen Nachweis- und Auflösungsvermögens bietet die MS qualitative und quantitative Analysen anorganischer und organischer Bestandteile komplexer Probengemische. Massenspektrometer setzt man als eigenständige Geräte ein oder auch gekoppelt in z.B. Verbindung mit der Gas- oder Flüssigkeits-Chromatographie [SCHWEDT, 2007].

### 2.15.1. Aufbau eines Massenspektrometers

Ein Massenspektrometer ist prinzipiell aus einem Einlasssystem, einer Ionenquelle mit einem System zur Beschleunigung der Ionen, dem Analysatorsystem und einem Detektor in Verbindung mit der Registrier- und Auswertungseinrichtung (Abbildung 10) zusammengesetzt. Um Kollisionen von Ionen und Molekülen oder Atomen so gering wie möglich zu halten, setzt man ein Hochvakuum im Analysatorteil ein; es wird mit Drücken von  $10^{-3}$  bis  $10^{-8}$  Pa gearbeitet [OTTO, 2006].

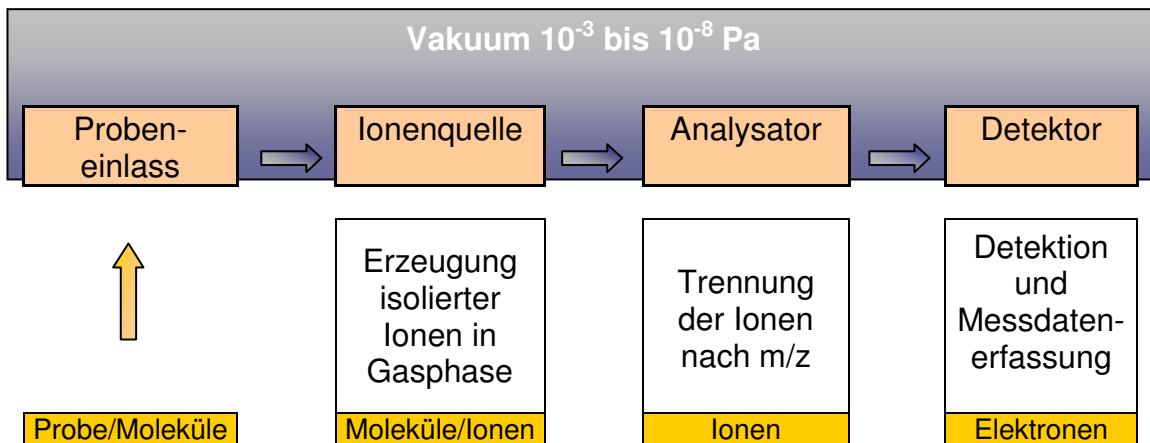


Abbildung 10 Blockbild eines Massenspektrometers und Funktion der Baugruppen

Quelle: [PAUZENBERGER, 2008]

### 2.15.1.1. Einlasssystem

Die zu analysierende Probensubstanz muss in das Massenspektrometer eingeführt werden, ohne dass dabei das Vakuum im Gerät zusammenbricht. Dazu gibt es indirekte und direkte Aufgabesysteme.

Bei der indirekten Probenaufgabe wird die Probe gasförmig in das Spektrometer eingebracht. Bei Direkteinlasssystemen, die vor allem bei schlecht verdampfenden Verbindungen eingesetzt werden, wird die Substanz mithilfe einer Schubstange unmittelbar in die Ionenquelle eingeschleust. Anschließend wird die Probe verdampft und fragmentiert.

Die dritte Variante wäre die Kopplung des Massenspektrometers mit einem Chromatographen. Dabei kann die Probe über ein Interface (Verbindungsteil GC-MS) in das MS eingeführt werden. Die Kopplung von GC-MS hat den Vorteil, dass die Komponenten bereits verdampft und getrennt in das MS gelangen [GERHARDS et al., 1997; OTTO, 2006].

### 2.15.1.2. Ionenquelle

Die Funktion der Ionenquelle besteht darin, aus dem Analyten isolierte positive Ionen in der Gasphase zu erzeugen und diese zum Analysator hin zu beschleunigen. Die vom Einlasssystem in die Ionenquelle gelangende dampfförmige Probe wird dort durch Elektronenstöße ionisiert. Zur Ionisation

nutzt man Elektronen, Ionen, Moleküle und Photonen sowie thermische oder elektrische Energie. Die Art der Ionenquelle hängt sehr eng mit der gewünschten Analyse zusammen [OTTO, 2006].

Die Elektronenstoß-Ionenquelle (EI, electron impact) ist die universellste Ionisationsmethode der organischen Massenspektrometrie und ist bei allen GC-MS-Geräten das Standardverfahren. Als Elektronenquelle eignet sich ein erhitzter Rhenium- oder Wolframdraht. Durch Beschuss der Moleküle mit hoch energetischen Elektronen entstehen zunächst positiv geladene Ionen mit Energien um 70 eV. Da das Ionisierungspotential organischer Moleküle unter 15 eV liegt, führt die hohe Überschussenergie in Molekülionen ( $M^+$ ) zur Fragmentierung, d.h. Spaltung chemischer Bindungen in Radikal-Kationen und neutrale Teilchen [HÜBSCHMANN, 1996; OTTO, 2006].

#### **2.15.1.3. Trenn- oder Analysatorsystem bzw. Massenselektor**

Der Analysator dient zur Trennung (Massenfokussierung) der in der Ionenquelle gebildeten Radikal-Kationen sowie zur Separation des Masse-Ladungs-Verhältnis der Ionen. Ziel ist es einerseits, möglichst minimale Massen differenzieren zu können, d.h. eine hohe Auflösung zu erreichen und andererseits einen suffizienten Durchlass von Ionen zu garantieren, um einen gut auswertbaren Ionenstrom zu erhalten. Dazu gibt es mehrere Methoden, die sich teilweise erheblich in der Auflösung unterscheiden. Jedes Massenspektrum ist die quantitative Analyse der Vorgänge während des Ionisierungsprozesses durch das Trennsystem [OTTO, 2006; SCHWEDT, 2007].

#### **2.15.1.4. Detektor**

Wenn Ionen auf den Detektor treffen, erzeugen sie ein elektrisches Signal, das proportional zur Zahl der Ionen ist. Bei der Datenaufnahme des Massenspektrometers unterscheidet man die Detektion vollständiger Spektren (TIC, total ion current). Dieser Totalionenstrom ist die Gesamtzahl der durch den Analysator tretenden Ionen, man spricht vom „full scan“.

Des Weiteren gibt es die Einzelmassen-Registrierung (SIM, selected ion monitoring; MID, multiple ion detection). Jene Detektion wird angewendet, sobald die zu untersuchende Probenkomponente bekannt ist. Diese Methode wird häufig in der Drogenanalytik verwendet. Die weiteren Einheiten wie Schreiber oder auch EDV-Systeme dienen zur Aufzeichnung der getrennten positiven Ionen nach Massenzahl ( $m/z$ ) und Intensität in Form eines Massenspektrums [HÜBSCHMANN, 1996; GERHARDS et al., 1997].



## Kapitel III

### 3. MATERIAL UND METHODEN

#### 3.1. Methodenentwicklung für GC-MS-Untersuchungen mittels HS-SPME

##### 3.1.1. Raumlufthanalyse von Klassischen Wiener Kaffeehäusern mittels HS-SPME-GC-MS

Um bestmögliche Ergebnisse der Kaffeehaus-Analysen erzielen zu können, wurden im Vorfeld einige Versuche getätigt, welche die SPME-„Sampling“-Methode optimieren sollen. Hierzu führte man die ersten Raumluftmessungen in Kaffeehäusern durch, die nicht weit von der Universität Wien entfernt waren. Es wurden Cafés ausgewählt, in denen auch der Kaffee einen besonderen Stellenwert einnahm, da es galt, möglichst viele Röstkaffeestoffe einzufangen. Günstig dafür erschien das *Café Blaustern* und *The Roast*, in welchen die Kaffeebohnen im Gästeraum selber geröstet werden.

Durch Variation der Messdauer im Kaffeehaus konnten bereits Unterschiede im Chromatogramm und in der Analyse festgestellt werden. Anfangs wurde das SPME-„Sampling“-Gerät eine Stunde aufgestellt, was sich bei der anschließenden Auswertung als zu kurz erwies. Bei Luftanalysen muss berücksichtigt werden, dass eine hohe Anzahl an Komponenten mit sehr geringer Konzentration vorkommt und dass sie bei zu kurzer Messdauer nicht erfasst werden können. Nachfolgend wurde die Dauer der Messung auf drei, sechs und acht Stunden erhöht. Bei den achtstündigen Messungen zeigte sich

das beste Ergebnis, denn das Chromatogramm erfasste Substanzen, die bei kürzeren Analysezeiten nicht auffindbar waren. Des Weiteren wurden im Kaffeehaus mehrere Messfasern positioniert, um auch die Methode durch Veränderungen des Temperaturprogramms am Gaschromatographen optimieren zu können. Das heißt, eine analoge Messdauer bei Änderung der Einspritztemperaturen bzw. der Aufheizraten. Auch hier konnten wesentliche Abweichungen im Chromatogramm beobachtet werden. Wiederum konnte durch Vergleich der analogen Raumluft-Untersuchungen festgestellt werden, bei welchem Temperaturprogramm ein Optimum erzielt werden kann.

Zugleich wurde getestet, ob sich diese Methode auch für die Kaffeearomaanalyse eignet. Es erfolgten Messungen mit einem frisch zubereiteten starken Kaffee, wobei ebenfalls durch Variation der Messdauer die Methode optimiert wurde. Es stellte sich heraus, dass eine Messdauer von 24 Stunden am idealsten war, denn es konnten auch Kaffeearomastoffe, welche nur in Spuren im Aroma enthalten sind, detektiert werden. Die Retentionszeiten ( $R_t$ ) der einzelnen Substanzen sind stets konstant und eine charakteristische Größe für die betrachtende Komponente, sodass mittels Gaschromatographie qualitative Aussagen möglich sind. Anhand der vollständigen Kaffeearomaliste der Autoren *Nijssen et al.* (1996) wurden die aufgefundenen Röstkaffeestoffe zugeordnet und identifiziert. So konnte im Laufe der Zeit eine Methode durch stetige Verfeinerung entwickelt werden, die sich als optimal für die im Rahmen dieser Arbeit getätigten Analysen erwies. In den Untersuchungen zum Duft Wiener Kaffeehäuser wurde von der Leitung des WWTF-Projekts das *Kleine Café*, das Vorstadtcafé *Ritter* und die Café-Konditorei *Aida* für diese Arbeit vorgegeben. Zwei andere „typische“ Wiener Kaffeehaus-Institutionen, nämlich das *Hawelka* (1. Bezirk) und das *Sperl* (6. Bezirk) wurden in einer anderen Arbeit beschrieben (Pestitschek, 2008).

### **3.1.2. Aromaanalyse von ausgewählten *Arabica*- und *Robusta*-Sorten mittels HS-SPME-GC-MS**

#### **3.1.2.1. Probenauswahl**

*Arabica*- und *Robusta*-Sorten unterscheiden sich nicht nur optisch voneinander, sondern auch im Aroma und Geschmack. Ziel dieser Messungen ist es, die wesentlichen Unterscheidungsmerkmale der flüchtigen Aromasubstanzen von *Arabica*- und *Robusta*-Kaffee zu analysieren und zu dokumentieren. Welche Aromakomponenten sind charakteristisch für die jeweiligen Sorten. Sind Differenzen auch zwischen nasser und trockener Aufbereitung der Rohbohne feststellbar. Welche Substanzen geben der Rohbohne ihr Aroma und wie verändert sich das Aromaprofil während der Röstung. Mit Herrn Professor *Edelbauer* vom Kaffeeinstitut im zwölften Gemeindebezirk der Stadt Wien wurden folgende für diese Arbeit relevanten Kaffeesorten ausgewählt:

#### *ROBUSTA MADAGASKAR 2006* aus Madagaskar

Die *Robusta Madagaskar* zählt zu den minderwertigen Kaffee-Qualitäten und unterscheidet sich optisch von den *Arabica*-Sorten durch ihre Bohnengröße. *Robusta*-Varietäten sind schmaler und runder als *Arabica*-Sorten. Sie werden meist in Mischungen – bevorzugt in italienischen – verwendet. *Robusta Madagaskar* zeigt einen erdigen und rauerem Geschmack und Duft; verantwortlich dafür sind die höheren Gehalte an Gerb- und Bitterstoffen.

#### *ARABICA SANTOS 2006* aus Brasilien

Die brasilianische *Santos* zeichnet sich durch ihren weichen, naturmilden Geschmack und ihren äußerst geringen Säuregehalt aus. Sie ist im Gegensatz zum *Sidamo* ungewaschen. Der geringe Säuregehalt ist das Resultat der bei der trockenen Aufbereitung nicht eintretender Fermentation.

### *ARABICA SIDAMO 2006* aus Äthiopien

Als *Sidamo*-Kaffee bezeichnet man eine hochqualitative *Arabica*-Sorte, die in der Region *Sidamo* im äthiopischen Hochland beheimatet ist und dort auch kultiviert und im nassen Aufbereitungsschema verarbeitet wird. Der *Sidamo* hat ein außergewöhnlich würziges und sehr intensives Aroma, welches leicht nussige und schokoladenartige Nuancen aufweist. Er wird auch wegen seiner milden Säure, dem kräftigen Kaffeearoma und dem geringen Koffeingehalt bevorzugt. Der *Sidamo* wird selten für Mischungen verwendet, sondern sortenrein verkauft, da er als sehr hochwertig gilt und von Kennern aus aller Welt geschätzt wird.

Die drei Rohkaffeesorten wurden im Kaffeeinstitut unter Aufsicht von Herrn Professor *Edelbauer* per Hand geröstet. Die frische Röstung ist wichtig, um Lagerverluste, bei denen sich Aromakomponenten verflüchtigen, ausschließen zu können. Es wurde je 150 g der genannten Kaffeesorten per Probenröster auf mittlere Farbe geröstet.

#### **3.1.2.2. Röstung der ausgewählten Kaffeesorten**

Empfehlenswert bei diesen kleinen Röstmengen von je 150 g ist ein Probenröster. Dabei handelt es sich um eine feuerfeste Metall-Trommel mit circa 1.0 Liter Volumen; ausgestattet mit einem Füllfenster. Diese Apparatur setzt man auf ein dafür vorgesehenes Gestell. Darunter befindet sich ein Behältnis, das man mit Spiritus befüllt. In die Trommel wird durch das Füllfenster der Rohkaffee hinein gegeben. Nachdem man den Spiritus entzündet hat, setzt man die Trommel auf das Gestell und dreht sie gleichmäßig mit einer Handkurbel im Uhrzeigersinn. Nach einer gewissen Zeit im Minutenbereich ist ein „Knacken“ zu hören – hier wird die Röstung unterbrochen. Diesen Vorgang nennt man „egalisieren“. Man nimmt die Trommel von der Flamme und schüttelt sie, damit die Röstfarbe gleichmäßig wird. Danach öffnet man das Fenster und wirft einen Blick hinein, um zu sehen, wie weit die Röstung vorangeschritten ist. Wichtig dabei ist, dass man solange

weiter rüttelt, bis kein Knacken mehr zu hören ist. Dies ist erforderlich, um eine Überhitzung zu vermeiden. Danach setzt man den Röstvorgang fort – in unserem Fall auf mittlere Röstung.

Eine unterschiedliche Röstdauer ist nicht außergewöhnlich, da sich die Kaffeesorten in ihrer Größe und Oberfläche stark unterscheiden.

Große Kaffeekonzerne berieseln nach der Röstung die noch heißen Kaffeebohnen mit kaltem Wasser, um den frischen Röstkaffee rascher zu kühlen und das Gewicht zu erhöhen. Dies führt jedoch zu erheblichen Qualitätseinbußen, da ein hoher Feuchtigkeitsgehalt zu einer schlechten Lagerfähigkeit führt. Gesetzlich sind 5% Restwasser in der Kaffeebohne zulässig.

Um schonend zu temperieren wurde das Röstgut in große Siebe geleert und im Luftstrom durch Auf- und Abbewegungen gekühlt. Dies wirkt sich natürlich positiv auf die Kaffeequalität aus. Die Kaffeebohnen haben durch die entweichenden Gase 50 bis 90% an Volumen zugenommen [EDELBAUER, 2008].

Nach dem Kühlvorgang wurden die einzelnen Kaffeeproben luftdicht verschlossen und ins Riechstoff-Labor gebracht. Am darauf folgenden Tag wurde mit der Messserie begonnen.

Beim minderwertigen *Madagaskar* beträgt die Röstung annähernd 6.5 Minuten – bei einem Gewichtsverlust von 20%. Der ungewaschene *Santos* hat, da er trocken aufbereitet wurde, einen dunklen Schnitt und einen Gewichtsverlust von etwa 16%; der Röstvorgang dauerte rund 6 Minuten. Der *Sidamo* hat eine rauere Oberfläche und benötigt – um dasselbe Röstergebnis zu erzielen – etwa 8 Minuten. Er verliert ungefähr 15% seines Ursprungsgewichtes. Außerdem hat er durch seine nasse Aufbereitung einen weißen Schnitt in der Bohnenmitte. In Abbildung 11 kann sehr gut gezeigt werden, dass sich die Sorten optisch deutlich voneinander unterscheiden.

**1. ROHKAFFEE – ROBUSTA MADAGASKAR 2006****2. ROBUSTA – MADAGASKAR 2006**

Röstung	6.5 min
mit Kühlen	7.5 min
Gewicht danach	120 g
Gewichtsverlust	20 %

**3. ARABICA – SANTOS 2006**

Röstung	6.0 min
mit Kühlen	7.0 min
Gewicht danach	126 g
Gewichtsverlust	16 %

**4. ARABICA – SIDAMO 2006**

Röstung	8.5 min
mit Kühlen	10.0 min
Gewicht danach	127 g
Gewichtsverlust	15 %



Abbildung 11 Verwendete Kaffeesorten (1: Rohkaffe Madagaskar;  
2: Röstkaffe Madagaskar; 3: Santos; 4: Sidamo);  
Foto: [PAUZENBERGER, 2008]

**3.1.2.3. Probenvorbereitung**

Für jede Messung wurden 30 g Kaffeebohnen eingewogen und mit einer *Zassenhaus-Original*-Handmühle auf eine Partikelgröße von 400 bis 800 µm gemahlen. Die Verwendung einer mechanischen Kaffeemühle verhindert größere Aromaverluste, da die Erwärmung durch die Reibung minimiert ist. Das nachfolgende Zubereitungsschema wurde nacheinander bei allen drei Kaffeesorten angewandt. Es ist darauf zu achten, dass mit konstanten Standardbedingungen, wie beispielsweise „Sample“-Dauer, Wassertemperatur

und –menge sowie Mahlgrad gearbeitet wird, um normierte Ergebnisse zu erhalten und diese vergleichen zu können.

#### **3.1.2.4. Zubereitung der gemahlenden Kaffeebohnen**

Die Zubereitung erfolgte mit einer herkömmlichen Filtermaschine der Marke *Krups*, Type *Duotheek Plus F*. Für diese Versuchsserie wurden jeweils 30 g gemahlene *Santos*-, *Sidamo*- und *Madagaskar*-Bohnen in einen *Melitta*-Kaffeefilter – Größe 4 und ungebleicht – eingewogen. Dabei ist in dem Wassertank der Filtermaschine 200 ml kaltes Wiener Hochquellwasser eingefüllt worden. Die Auslauftemperatur betrug bei jeder Messung etwa 85°C, was dem Optimum entspricht.

Das durch Perkolation gewonnene heiße Kaffeegetränk ist mithilfe eines 5 ml Becherglases in ein *Sample Vial* gefüllt worden. Dabei wurde bei jeder Messung eine Menge von 3 ml eingefüllt. Die Verschluss-Vorrichtung mit Silikondichtung ist mit einer dafür vorgesehenen Zange absolut luftdicht verschließbar. Dies ist notwendig, um Fremdgerüche abzugrenzen und um freigeordnete Aromakomponenten zu erhalten.

#### **3.1.2.5. Probennahme von frisch gebrühten Kaffee mittels HS-SPME**

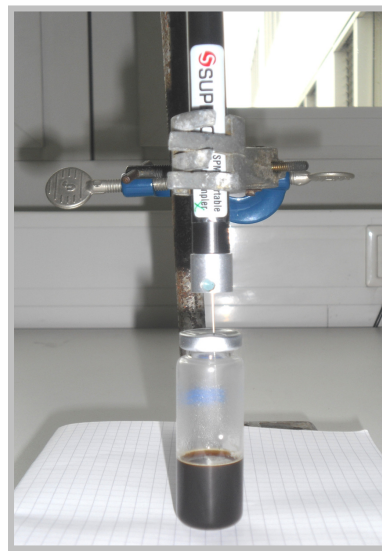
Vor jeder Analyse muss die SPME-Faser für mindestens fünf Minuten im Injektorblock des Gaschromatographen bei 250°C konditioniert werden [JORDÃO et al., 2006]. Erfahrungswerte haben gezeigt, dass eine Ausheizzeit von 20 Minuten anzuwenden ist, um die Faser einwandfrei zu reinigen und um Rückstände zu vermeiden.

Um akzeptable Resultate zu erzielen, mussten einige Versuchsreihen durchgeführt werden, da es noch keine tatsächlich anwendbaren Erfahrungswerte bezüglich der Kaffee-Einwirkzeit auf die beschichtete SPME-Faser gibt. Die ersten Versuche fanden zwischen zwanzig, dreißig, fünfzig, sechzig und siebzig Minuten statt. Die im Rahmen dieser Arbeit optimale Nachweisgrenze erwies sich bei 24 Stunden. Der SPME-Faserhalter mit

eingebauter Faser ist an eine dafür vorgesehene Apparatur per Epruvettenhalter befestigt worden. Damit man den kaffeebefüllten *Sample Vial* darunter platzieren konnte, wurde die Apparatur vertikal – etwa fünfzehn Zentimeter – über der Tischfläche fixiert. Mit der Fasernadel wird das *Septum* des *Vials* durchstoßen und die beschichtete Faser mittels „Plunger“ durch Hinunterdrücken ausgefahren (Abbildung 12). Die Quarzfaser darf nicht in das Kaffeegetränk eintauchen, sondern sollte in Dampfphase zur 24-stündigen Anreicherung gehalten werden. Man fixiert die Faser mit dem Gewinde, das man händisch in die dafür vorgesehene Verankerung gibt. Die flüchtigen Komponenten der zu messenden Kaffeesubstanzen bleiben auf der beschichteten Vorderspitze haften. Nach Anreicherung der flüchtigen Bestandteile wird die Faser durch Hinaufdrücken des „Plungers“ eingefahren und so können die Aromakomponenten im nachfolgenden Schritt mittels GC-MS analysiert werden.

Die erhaltenen Resultate der Kaffeegetränke-Analysen können den Ergebnissen der Kaffeehaus-Untersuchungen gegenübergestellt werden, da mit demselben Temperaturprogramm gearbeitet wurde und somit die Retentionszeiten der einzelnen Komponenten vergleichbar sind.

Abbildung 12 Kaffeegetränk im *Sample Vial* mit manueller HS-SPME-Vorrichtung;  
Foto: [PAUZENBERGER, 2008]



### 3.1.3. Entwickelte Methode

Für alle im Rahmen dieser Arbeit getätigten Messungen wurde dieselbe Versuchsanordnung angewendet, damit die Resultate jeder einzelnen Analyse zum Vergleich herangezogen werden können. Die Retentionszeit einer bestimmten Substanz ist eine charakteristische Größe. Das heißt in jedem Chromatogramm zeigt sich die detektierte Substanz zur annähernd selben Zeit.



### **3.1.3.1. Manuelle HS-SPME-Vorrichtung und verwendete Faser**

Die für diese Arbeit verwendete SPME-Faser (57348-U, Fa. *Supelco*) wird in einem speziellen Faserhalter (57330-U, Fa. *Supelco*), welcher in erster Linie für die manuelle Probennahme konzipiert ist, verankert (Abbildung 13). Der Faserhalter schützt die beschichtete Faser und schafft eine Kontrolle der Fasereexposition während der Adsorptions- und Desorptionsvorgänge [SIGMA-ALDRICH CHEMIE GMBH, 2001].

Die für diese Messungen verwendete Faser ist mit einer Divinylbenzen /Carboxen/Polydimethylsiloxan (DVB/CAR/PDMS)-Beschichtung der Stärke 50/30  $\mu\text{m}$  überzogen. Die Faserstärke und Beschichtung hat sich schon in einigen Aromastudien unter anderem von Kaffeegetränken oder Wein bewährt [JORDÃO et al., 2006; AKIYAMA et al., 2008]. In einigen Studien konnte gezeigt werden, dass die 50/30  $\mu\text{m}$  DVB/CAR/PDMS-Faser eine höhere Extraktionsleistung als die 100  $\mu\text{m}$  PDMS-Faser hat [JORDÃO et al., 2006].

Faser: Beschichtung: 50/30  $\mu\text{m}$  Divinylbenzen/Carboxen/Polydimethylsiloxan (DVB/CAR/PDMS)



Abbildung 13    Manueller SPME-Faserhalter mit eingebauter Faser  
Quelle: [SIGMA-ALDRICH CHEMIE GMBH, 2001]

### **3.1.3.2. Gaschromatographische – massenspektrometrische Parameter**

Im Rahmen dieser Arbeit kam die Gaschromatographie mit einem massenselektiven Detektor zum Einsatz. Die Kopplung eines Massenspektrometers an den Gaschromatographen ist eine Hybridtechnik und stellt vor allem in der Analytik von flüchtigen Gemischen, primär wegen der hohen Nachweisgrenze im „full scan“-Modus, ein nicht mehr wegzudenkendes Hilfsmittel dar. Dabei dient der Gaschromatograph zur Auftrennung des zu

untersuchenden Stoffgemisches in seine Einzelkomponenten und das Massenspektrometer zur Identifizierung der getrennten einzelnen Komponenten. Bei dieser direkten Kopplung wird das Ende der Trennsäule bis in die Ionenquelle des Massenspektrometers vorgeschoben – die aufgetrennten Substanzen können somit direkt und ungehindert in das MS gelangen. Dieses so genannte *Interface* ist in der Abbildung 14 rot eingekreist.

Nachdem die Proben aus dem Headspace (Vial und Innenraum) gezogen wurden, ist diese mithilfe eines spezifischen Faserhalter in den Injektorblock des GC aufgegeben worden und so in Position gehalten (siehe Abbildung 14: roter Pfeil). Dabei erfolgt die Desorption der Analyten ohne weitere Probenbereitung direkt im Injektor des Gaschromatographen. Die angereicherte Faser wird dabei durch Drücken des „Plungers“ in den beheizten Einspritzblock gespritzt. Die thermische Desorption wurde bei 250°C für 2 Minuten im Injektorblock durchgeführt.



Abbildung 14 Gaschromatograph - Massenspektrometer (Gerätekombination der Firma Thermo Fisher) mit SPME-Faser im Injektorblock; Interface;  
Foto: [PAUZENBERGER, 2008]

Ein Gaschromatograph *Trace GC Ultra* und ein massenselektiver Detektor *DSQ II* der Firma *Thermo Fisher Scientific* wurde für die Analysen bereitgestellt. Ausgestattet mit einer 60 m Kapillarsäule (TRACE TR-5MS GC Column, 60m x

0.25mmID x 0.25 µm Film) der Firma *Supelco*. Die Säulentemperatur wurde anfangs für zwei Minuten auf 40 °C gehalten, dann wurde die Temperatur auf 250 °C angehoben. Die Methode wurde so ausgewählt, dass pro Minute die Temperatur um 3 °C steigt. Die Temperatur der Ionenquelle im MS betrug 200 °C. Die Dauer der entwickelten Methode belief sich vom Einspritzen der SPME-Faser in den Injektorblock auf etwa 55 Minuten.

Als Trägergas wurde Helium mit einer Strömungsgeschwindigkeit von 1.0 ml/min eingesetzt. Die Injektion erfolgte im „splitless“-Modus. Aufgrund der unterschiedlichen Flüchtigkeit und der Wechselwirkungen mit der inneren Oberfläche der Säule kam es zu einer Auftrennung der Substanzen. Jede einzelne Komponente hat dabei eine charakteristische Laufgeschwindigkeit, die im Chromatogramm als Retentionszeit ( $R_t$ ) detektiert wurde. Danach kam es zur Ionisierung, die im Rahmen dieser Arbeit durch das Elektronenstoßverfahren (EI, electron impact) erfolgte und heute bei allen GC-MS-Geräten das Standardverfahren ist. Der Massenscan erfolgte im „full scan“-Bereich  $m/z = 50$  bis 350.

### **3.1.3.3. Analytische Bedingungen – technische Daten**

#### **Festphasenmikroextraktion**

Probenaufgabe:	manuelle HS-SPME-Vorrichtung, (Artikelnr. 57348-U, 57330-U, <i>Supelco</i> )
Fasermaterial:	DVB/CAR/PDMS
Konditionierung:	20 min, 250 °C, vor Analyse
Desorption:	GC-Injektor

#### **Gaschromatographie**

Gerät:	Thermo Sci., Trace GC Ultra
Trägergas:	UN1046 Helium, verdichtet
Trägerschwindigkeit:	1ml/min, constant flow
Trennsäule:	60 m (Artikelnr.: 260F154P, TR-5MS)
Innendurchmesser:	0.25 mm

Filmdicke:	0.25 µm
Injektorblock:	split/splitless Injektor, Temperatur 250 °C, ausgestattet mit einem Inlet Liner für SPME, 0.75 mm ID (Artikelnr.: 45352083, <i>Supelco</i> )

#### *Injektorprogramm*

Betriebsart:	splitlos (2 min)
Equilibration time:	30 Sekunden

#### *Ofenprogrammprogramm*

Anfangstemperatur:	40 °C
Haltezeit:	2 min
Heizrate:	3 °C/min
Endtemperatur:	250 °C
Gesamtzeit:	55.33 min

### **Massenspektrometrie**

Gerät:	Thermo DSQ II, direkte Kopplung (Interface)
Transferline-Temperatur:	250 °C
Ionenquelle:	200 °C, EI
Scanbereich:	50 – 350 amu/ 0.35 sec; full scan; TIC
Elektronenenergie:	70 eV

#### **3.1.3.4. Auswertung des Massenspektrums**

Im EI-Massenspektrum ist das Muster der Fragmentierung wiedergegeben. Masse-Ladungs-Verhältnis ( $m/z$ ) und Intensität der Fragmente sind direkt dem Linienspektrum entnehmbar. Die Abspaltung von Neutralteilchen zeigt sich als Differenz zwischen Molekülion und daraus entstandenen Fragmenten. Zur Hilfestellung wurde ein „Screenshot“ (siehe Abbildung 15) gemacht, der das Massenspektrum von Furfurylacetat zeigt. Furfurylacetat wurde in den Chromatogrammen der Kaffeegetränke sowie im *Kleinen Café* und in der *Aida* bei einer Retentionszeit ( $R_t$ ) von etwa 23 Minuten nachgewiesen. Das Molekülion  $M^+$  ist erwartungsgemäß bei der Massenzahl  $m/z = 140$  und

offensichtlich nicht der intensivste Peak im Spektrum. Der größte Peak im Chromatogramm, der Basispeak, ist in unserem Beispiel ein Fragment ( $m/z = 81$ ), das durch Abspaltung der Acetatgruppe ( $-\text{CH}_3\text{COO}$ ) entstanden ist. Der Basispeak wird gleich 100 gesetzt und die übrigen Ionenintensitäten in Prozent davon angegeben. Die kleineren Peaks, z.B.  $m/z = 82$ , wäre ein Isotopenpeak und rührt vom  $^{13}\text{C}$ -Isotop her [HÜBSCHMANN, 1996; OTTO, 2006].

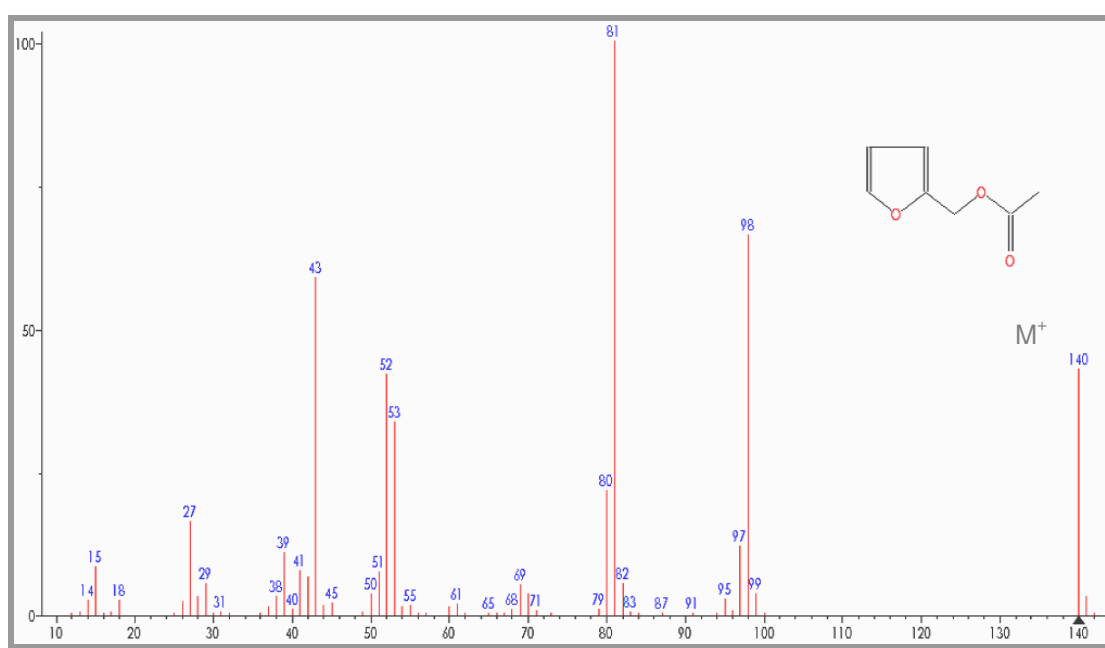


Abbildung 15 Massenspektrum von Furfurylacetat; Struktur und Molekülion

Quelle: [PAUZENBERGER, 2008]

Das Massenspektrometer identifiziert jede einzelne Substanz. Auf diese Weise erhält man ein Chromatogramm, anhand dessen Aroma- und Innenluft-Bestandteile genau aufgeschlüsselt werden.

### 3.1.3.5. Auswertung der GC-Chromatogramme

Durch moderne Datenverarbeitung wird die Auswertung und Interpretation der Spektren deutlich bequemer. In handelsüblichen Bibliotheken sind Referenzspektren abgelegt, die mit den gemessenen Spektren verglichen werden können. Dabei wird der Grad der Übereinstimmung („Similarity“)

angegeben, d.h. wie gut das gemessene Spektrum mit dem Bibliothekseintrag übereinstimmt (siehe Abbildung 16: Raster links unten) [GERHARDS et al., 1997]. Die Datenerfassung und Auswertung der erfolgten Messungen erfolgte durch die Software *Xcalibur* des GC-MS-Gerätes (Thermo Fisher Scientific Inc.). Die erhaltenen Massenspektren wurden anhand folgender Spektrenbibliotheken ausgewertet:

- Wiley Registry<sup>TM</sup> of Mass Spectral Data 8<sup>th</sup> Edition
- NIST/EPA/NIH Mass Spectral Library 1.5a (match factors >850)

Die Bibliotheken erleichtern außerdem das Auffinden einzelner Komponenten durch Eingabe verschiedener Optionen wie beispielsweise Molgewicht, Synonyme der zu findenden Substanzen, CAS-Nummer oder durch Rückblick der Suche. Abbildung 16 zeigt als Beispiel einer Bibliotheksuche Furfurylalkohol, welcher in allen getätigten Analysen nachgewiesen wurde. Die Bibliothek enthält zusätzliche Informationen, wie Struktur, Molgewicht und Handelsnamen.

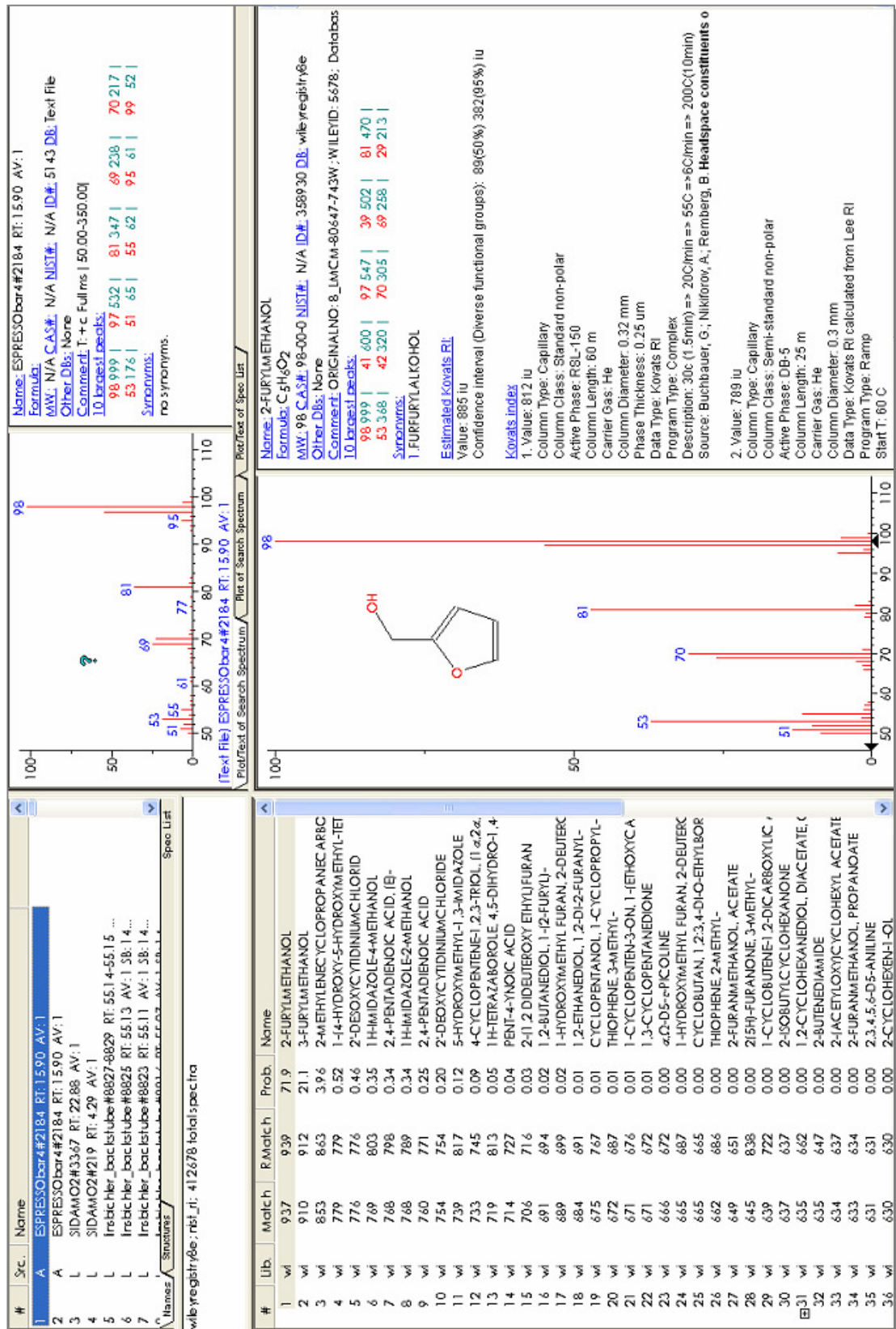


Abbildung 16 Informationen in einer handelsüblichen Bibliothek  
am Beispiel Furfurylalkohol; Quelle: [PAUZENBERGER, 2008]

Man kann die beiden genannten Spektrenbibliotheken in Kombination anwenden oder einzeln nutzen. Eine weitere Hilfestellung bei den Kaffeehaus-Analysen leistete die Röstkaffee-Analyse der Kaffeegetränke. Hier konnten bereits viele der 835 Röstkaffeestoffe, welche in der vollständigen Liste von *Nijssen et al.* (1996) eingetragen sind, nachgewiesen werden. Da die Untersuchungsparameter identisch waren – weisen die detektierten Verbindungen im Chromatogramm dieselben Retentionszeiten auf und können zur vergleichenden Gegenüberstellung herangezogen werden. Nachfolgend wurde auch ein Zigarettenrauch-Ausschlusstest als notwendig erachtet, der wiederum mit derselben Methode durchgeführt wurde, um die Ergebnisse vergleichen zu können.



## KAPITEL IV

### 4. ERGEBNISSE UND DISKUSSION

#### 4.1. Untersuchung der Kaffeegetränke mittels HS-SPME-GC-MS

Die folgenden Chromatogramme wurden anhand der Spektrenbibliotheken von WILEY und NIST ausgewertet und mithilfe der vollständigen Kaffeearomaliste nach *Nijssen et al.* (1996) verglichen und einander gegenübergestellt.

Die Messung mittels GC-MS fand im *full scan*-Modus statt. Alle Chromatogramme sind Totalionenchromatogramme (TIC; total ion current), die eine rein qualitative Analyse erlauben. Im Folgenden werden alle Chromatogramme der durchgeführten Messungen illustriert und in tabellarischer Form dargestellt.

##### 4.1.1. Qualitative Auswertung der *Robusta Madagascar* Rohbohnen

Das Aromaprofil einer Rohbohne unterscheidet sich deutlich von dem einer Röstkaffeebohne. Um das Aroma der Rohbohnen zu detektieren, wurden diese grob zerstampft – in das *Sample Vial* gegeben und mithilfe eines Silikongummis luftdicht verschlossen. Es ist unmöglich ein Kaffeegetränk zuzubereiten, da die Rohbohnen zu hart sind, um sie malen zu können. Die Messung mittels SPME-Vorrichtung erfolgte ebenfalls 24 Stunden unter den analogen Bedingungen wie die der Kaffeegetränke. Das Aroma der *Robusta*-Rohbohnen wird allgemein als erbsig, grün und erdig-muffig mit leicht fruchtigen Nuancen beschrieben.

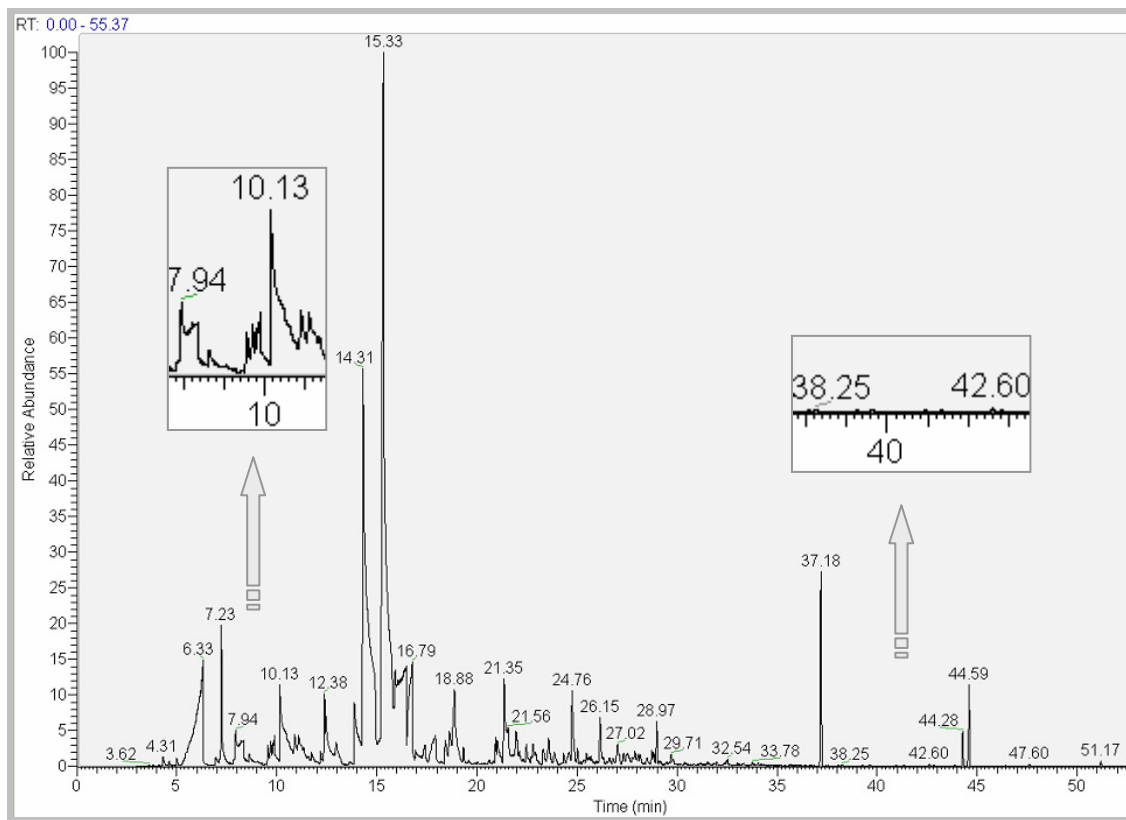


Abbildung 17 Chromatogramm: Rohbohnen *Robusta Madagascar*;  
24-Stunden-Messung mittels HS-SPME

Im Chromatogramm (Abbildung 17) der Rohbohne *Robusta Madagascar* wurden annähernd 340 Substanzen detektiert. Die zahlreichsten Verbindungsklassen waren Aldehyde wie zum Beispiel Propanal (1), 3-Isovaleraldehyd (3) oder Hexanal (11). Außerdem wurden einige Ketone, unter anderem Diacetyl (10) und  $\beta$ -Damascenon (38) aufgezeichnet. Die Verbindungsklassen der Säuren und Phenole waren mehrfach vertreten. Zu den Phenolen zählt Guajakol (25) und deren Abkömmlinge Ethyl- und Vinylguajakol (34 und 37). Bei den Säuren sind die geruchsintensive Valeriansäure (8) und Buttersäure (9) sowie Essigsäure (2) zu finden. Unter den detektierten Verbindungen fand sich auch eine Vielzahl an basischen Substanzen. Hierbei sind die Pyrazine 3-Isopropyl-2-methoxypyrazin (29), 3-Isobutyl-2-methoxypyrazin (32) und 2-Methoxy-3,5-dimethylpyrazin (33) zu nennen. Eine bedeutende Rolle spielt auch die Klasse der Furane, unter der 3-Hydroxy-4,5-dimethyl-2(5*H*)-furanon oder Sotolon (12), Furfural (13) und

Furfurylalkohol (14) zu nennen sind. Außerdem fanden sich im Chromatogramm schwefelhaltige Verbindungen, Pyrane und Ester.

Ein Ausschnitt der wichtigsten Aromastoffe von *Robusta Madagaskar* Rohbohne, die im Rahmen dieser Arbeit erfasst wurden, sind aus Tabelle 12 zu entnehmen.

**Tabelle 12** Geruchspotente Aromastoffe im Robusta Madagaskar Rohkaffee, 24-Stunden  
Messung mittels HS-SPME-GC-MS

Nr.	R <sub>t</sub> (min)	Geruchsstoff*	Synonym	Geruchseindruck <sup>‡</sup>
1	4,31	Propanal	Propionaldehyd	fruchtig
2	5,50-6,33	Essigsäure	Ethansäure	nach Essig
3	7,23	3-Methylbutanal	Isovaleraldehyd, Isovaleral	malzig, apfelähnlich
4	7,94	Heptanal	Hepatanaldehyd	ölig, fettig
5	9,42	Prenol	3-Methyl-2-buten-1-ol	fruchtig
6	10,13-10,73	Pyridin	Azin, Azabenzol	unangenehm
7	10,89	Toluol	Methylbenzol	blumig-stechend
8	11,55	Valeriansäure	Pentansäure	schweißig
9	11,58	Buttersäure	Butansäure	schweißig
10	12,17	Diacetyl	2,3-Butandion	butterartig
11	12,38	Hexanal	Capronaldehyd	fettig-grün
12	13,25	Sotolon	3-Hydroxy-4,5-dimethyl-2(5H)-furanon	würzig
13	14,31	Furfural	Furancarboxyaldehyd	bittermandelartig
14	15,33	2-Furfurylalkohol	2-Furanmethanol	stechend
15	16,52	Methylbuttersäureethylester		fruchtig
16	16,79	2-Methylbuttersäure		schweißig
17	17,64	3-Methylbuttersäure	Isovaleriansäure	schweißig
18	21,35	5-Methylfurfural	5-Methylcarboxaldehyd	bittermandelartig
19	21,55	Benzaldehyd	Benzcarbaldehyd	bittermandelartig
20	23,56	α-Terpinen	Mentha-1,3-dien	zitronenartig
21	24,76	(+)-Limonen	1,8-p-Menthadien	zitronenartig
22	25,02	Eucalyptol	1,8-Cineol	kampferartig
23	27,02	Linalooloxid		erdig-blumig
24	27,18	Thujon	Absinthol	mentholartig
25	28,19	o-Guajakol	2-Methoxyphenol	rauchig, phenolisch, süß
26	28,47	(+/-)-Linalool	3,7-Dimethyl-1,6-oktadien-3-ol	blumig-frisch (Maiglöckchen)
27	28,97	Nonanal	Pelargonaldehyd	fettig-rosig
28	29,71	Phenylcarbinol	Benzylalkohol	aromatisch
29	30,52	3-Isopropyl-2-methoxypyrazin		erbsig
30	31,59	Kampfer	(+)-Campher, Bornan-2-on	kampferartig
31	31,84	2-Nonenal (E-/Z-)		fettig, nach Karton
32	32,51	3-Isobutyl-2-methoxypyrazin		erbsig
33	32,54	2-Methoxy-3,5-dimethylpyrazin		erdig
34	37,18	Ethylguajakol	2-Methoxy-4-ethylphenol	süß, phenolisch
35	38,08	Isobornylacetat	Pichtosin	nach Fichtennadel
36	38,25	2-Methylisoborneol	MIB	muffig, erdig
37	39,61	Vinylguajakol	2-Methoxy-4-vinylphenol	rauchig, nach Nelke
38	42,60	β-Damascenon		gekochter Apfel, rosig
39	44,59	Skatol	3-Methylindol	fäkalartig, (blumig)

\* Übereinstimmung in NIST und WILEY: > 80 %; <sup>‡</sup> Literatur siehe Text

Den Peak mit höchster Intensität im Chromatogramm stellt **Furfurylalkohol** (14) bei einer Retentionszeit von 15.33 Minuten dar. Als Reinsubstanz ist Furanmethanol als eine schwach stechend riechende Flüssigkeit charakterisiert. In der Röstbohne derselben Sorte ist Furfurylalkohol auch vertreten, jedoch mit geringerer Intensität, da dieser sehr instabil ist. Der zweit höchste Peak im Chromatogramm ( $R_t$  14.31) stellt das **Furfural** (13) dar, das im Geruch dem Benzaldehyd – mit einer leichten Bittermandelnote – ähnelt. Das **Propanal** (1), ein  $C_3$ -Aldehyd, bei  $R_t$  4.31, besitzt einen Geruch der in der Literatur als fruchtig-erstickend beschrieben wird. Propanal ist in der Röstbohne nicht mehr vertreten, das heißt es wird während des Röstvorgangs abgebaut. Der ziemlich breite asymmetrische Peak bei  $R_t$  5.50-6.33 stellt **Essigsäure** (2) dar. Diese typisch nach Essig riechende Carbonsäure gilt in geringer Konzentration als natürlicher Aromastoff in Roh- und Röstkaffee [NIJSEN et al., 1996; BELITZ et al., 2008]. **Isovaleraldehyd** oder auch 3-Methylbutanal (3) bei einer Laufzeit von 7.23 Minuten gilt als Aldehyd mit malzigen und apfelähnlichen Geruch [ROTH und KORMANN, 1997]. **Heptanal** (4) ist in der Rohbohne natürlicherweise enthalten; mit einer sehr geringen Geruchsintensität. Dieser  $C_7$ -Aldehyd bei  $R_t$  7.94 besitzt einen eher fettigen Geruch [BELITZ et al., 2008]. Bei einer Retentionszeit von 9.42 wurde das **Prenol** (3-Methyl-2-buten-1-ol; 5), ein aliphatischer Alkohol, detektiert. Prenol als natürlicher Aromastoff im Rohkaffee mit geringer Geruchsintensität, wird in der Literatur als fruchtig riechend beschrieben [HOLSCHER und STEINHART, 1995].

**Pyridin** (6), ein Heteroaromat, welches bei einer  $R_t$  10.13-10.73 detektiert wurde, ist als Reinsubstanz als eher übel riechend charakterisiert. Im Chromatogramm, bei einer  $R_t$  von 10.89, kam es zum Nachweis von **Toluol** (7). Es besitzt einen benzolähnlichen, blumig-stechenden Geruch. Die Pentansäure oder auch **Valeriansäure** (8) hat einen eher unangenehm schweißigen Geruch und kam bei einer Laufzeit von 11.55 Minuten zum Vorschein [ROTH und KORMANN, 1997]. Die schweißig riechende **Buttersäure** (9), deren Konzentration sich beim Röstvorgang verdoppelt, wurde bei einer Zeit von 11.58 Minuten detektiert. Buttersäure gilt – trotz des unangenehmen an

ranziger Butter erinnernden Geruch – als Aromastoff in Roh- und Röstkaffee. Der einfachste Vertreter der Stoffklasse der Diketone, das **Diacetyl** oder 2,3-Butandion (10), konnte bei einer  $R_t$  von 12.17 nachgewiesen werden. Diacetyl besitzt einen ausgeprägten Geruch und Geschmack nach Butter (manchmal auch ranzig) und wird häufig in der Lebensmittelindustrie als Aromastoff eingesetzt [BAUER et al., 1997]. **Hexanal** ( $R_t$  12.38; 11) hat einen fettig-grünen Geruch, der in geringer Konzentration an unreife Früchte erinnert [MARTINETZ und HARTWIG, 1998]. Das Furan **Sotolon** (12), bei einer  $R_t$  von 13.25, ist in der Rohbohne nur in Spuren enthalten – es entsteht beim Rösten und besitzt ein sehr würziges Aroma [CZERNY und GROSCH, 2000]. **Methylbuttersäureethylester** (15) liegt als 2- und 3-Isomer vor und konnte hier nicht eindeutig identifiziert werden. Beide Isomere zeichnen sich durch eine fruchtige Geruchsnote aus und kommen bei einer Retentionszeit von 16.52. Die Konzentration des 3-Methylbuttersäureethylesters ist im Gegensatz zum 2-Isomer höher in der Rohbohne vertreten als im Röstkaffee. **2-Methylbuttersäure** (16) und **3-Methylbuttersäure** (Isovaleriansäure; 17) besitzen eine schweißige Geruchsnote und konnten bei einer  $R_t$  16.79 bzw. 17.64 detektiert werden [CZERNY und GROSCH, 2000].

Das **5-Methylfurfural** (18) bei einer Laufzeit von 21.35 ist im Aromaprofil ähnlich dem Furfural – es weist eine Bittermandelnote auf. **Benzaldehyd** (19) bei  $R_t$  21.55, ist in Roh- und Röstkaffeesorten enthalten, er zeichnet sich durch seinen aromatischen Bittermandelgeruch aus. Benzaldehyd wird in der Aroma- und Lebensmittelindustrie vielfältig eingesetzt [MARTINETZ und HARTWIG, 1998]. Bei einer Retentionszeit von 23.56 Minuten wurde das  **$\alpha$ -Terpinen** (20) detektiert. Dieses cyclische Terpen weist einen angenehmen Zitronengeruch auf. **(+)-Limonen** oder 1,8-p-Menthadien ( $R_t$  24.76; 21) kommt in der Natur sehr häufig vor und weist einen erfrischenden zitronen- und orangenähnlichen Geruch auf [BELITZ et al., 2008]. Das bei 25.02 detektierte **Eucalyptol** (22) weist einen kampferähnlichen-frischen Geruch auf und wurde schon in vielen Pflanzen nachgewiesen. Das **Linalooloxid** ( $R_t$  27.02; 23) existiert als cis- und trans-Isomer, deren Identität nicht eindeutig festgestellt werden konnte. Es zeichnet sich durch einen erdigen, blumigen, etwas bergamottähnlichen Geruch

aus. **Thujon** (24), ein cyclisches Terpenketon, wurde bei einer Retentionszeit von 27.18 nachgewiesen. Thujon kommt in der Natur in  $\alpha$ - und  $\beta$ -Form vor und weist eine mentholartige Geruchsnote auf [ROTH und KORMANN, 1997; MARTINETZ und HARTWIG, 1998]. **Guajakol** ( $R_t$  28.19; 25) und seine Abkömmlinge **Ethyl-** und **Vinylguajakol** ( $R_t$  37.18; 34 und  $R_t$  39.61; 37) sind Schlüsselaromastoffe in *Robusta*-Sorten (siehe Tabelle 6; 2.10.2). Sie sind in den *Robusta* Rohbohnen nur in Spuren enthalten und werden deswegen erst im nächsten Abschnitt näher behandelt. Das bei einer Retentionszeit von 28.47 Minuten detektierte **Linalool** (26) ist durch einen blumig-frischen Geruch, der an Maiglöckchen erinnert charakterisiert. Linalool ist ein natürlich vorkommender Aromastoff der Kaffeebohne mit hoher Geruchsintensität [BELITZ et al., 2008]. **Nonanal** (27) wurde bei  $R_t$  28.97 nachgewiesen; es hat einen prägnanten fettig-rosenähnlichen Geruch. **Phenylcarbinol** (28) kam im Chromatogramm bei einer  $R_t$  29.71; es weist einen schwachen, aromatischen Geruch auf [BAUER et al., 1997; ROTH und KORMANN, 1997].

In einer Untersuchung von *Vitzthum et al.* (1976) bilden die 3-Alkyl-2-methoxypyrazine **3-Isopropyl-2-methoxypyrazin** (29) und **3-Isobutyl-2-methoxypyrazin** (32) ( $R_t$  30.52 bzw. 32.51) den charakteristischen „grünen“ Geruch der Rohbohnen. In der Untersuchung von *Holscher und Steinhart* (1995), konnte bestätigt werden, dass das erbsenartig riechende 3-Isobutyl-2-methoxypyrazin den relevantesten Aromastoff im Rohkaffee darstellt. Dabei hat 3-Isobutyl-2-methoxypyrazin den höchsten Aromawert [HOLSCHER und STEINHART, 1995]. Die Methoxypyrazine überstehen, als sehr stabile Verbindungen, ohne weiteres den Röstvorgang und können somit im Kaffeegetränk in etwa denselben Konzentrationen nachgewiesen werden. Jedoch wird der Geruch der erbsig riechenden Methoxypyrazine durch die Vielfalt der intensiven Röstaromastoffe weitgehend unterdrückt. Nur, wenn die Konzentrationen der Alkylmethoxypyrazine, die von Bakterien synthetisiert werden, zu stark ansteigen, verursachen sie im Röstkaffee einen Aromafehler, den „*Potato taste*“ [BELITZ et al., 2008]. **(+)-Campher** (30), ein cyclisches Terpenketon, wurde bei einer Laufzeit von 31.59 Minuten detektiert. Kampfer weist eine penetrante kampferartige Note mit leicht minzigem Geruch auf

[MARTINETZ und HARTWIG, 1998]. **2-Nonenal** ( $R_t$  31.84; 31) liegt in (Z)- oder (E)-Form vor, die Isomeren konnten jedoch nicht eindeutig identifiziert werden. Das fettig, nach Karton riechende 2-Nonenal ist ein Oxidationsprodukt der ungesättigten Fettsäuren; es spielt eine große Rolle im Gesamtaroma der Rohbohne [HOLSCHEER und STEINHART, 1995; CZERNY und GROSCH, 2000]. Bei  $R_t$  32.54 wurde das erdig riechende **2-Methoxy-3,5-dimethylpyrazin** (33) nachgewiesen. **Isobornylacetat** (35) oder Pichtosin, welches bei einer Retentionszeit von 38.08 detektiert wurde, erinnert an den Geruch nach Fichtennadeln. **2-Methylisoborneol** (36; MIB) konnte bei  $R_t$  38.25 detektiert werden; es wird in der Literatur mit muffiger, schimmeliger und erdiger Geruchsnote beschrieben. In einer Studie von *Blank* und *Grosch* (2002) wird MIB als „character impact compound“ in *Robusta*-Sorten diskutiert. Die MIB-Konzentration ist in *Robusta*-Rohkaffeesorten höher als in *Arabica*-Varietäten [BLANK und GROSCH, 2002].

Das im Chromatogramm ( $R_t$  42.60) mit geringer Intensität detektierte  **$\beta$ -Damascenon** (38) weist einen blumig-rosigen und fruchtigen – an gekochten Apfel erinnernden – Geruch auf. Die Konzentration von  $\beta$ -Damascenon vervielfacht sich beim Röstvorgang um drei Zehnerpotenzen und wird folglich im nächsten Abschnitt näher beschrieben [BAUER et al., 1997; CZERNY und GROSCH, 2000]. Der Peak bei einer Retentionszeit von 44.59 Minuten stellt **3-Methylindol** oder Skatol (39) dar, eine Substanz mit fäkalem Geruch. Allerdings ist der Geruch in sehr starker Verdünnung blumig [ROTH und KORMANN, 1997].



#### 4.1.2. Qualitative Auswertung des *Robusta Madagaskar* Kaffeegetränk

Die Aromakonstellation des Kaffeegetränks aus *Robusta Madagaskar*-Röstbohnen (trocken aufbereitet) unterscheidet sich deutlich von Rohkaffee derselben Sorte sowie von jenen *Arabica*-Sorten, die im späteren Abschnitt behandelt werden.

*Robusta* zeigt im Gegensatz zu *Arabica* wesentlich höhere Gehalte an Alkylpyrazine und vor allem Phenole. Das wurde auch in dieser Arbeit bestätigt. Diese beiden Substanzklassen geben den *Robusta*-Sorten die erdigen und rauchig/phenolischen Geruchsnoten und wirken sich auch negativ auf das Gesamtaroma aus [BELITZ et al., 2008].

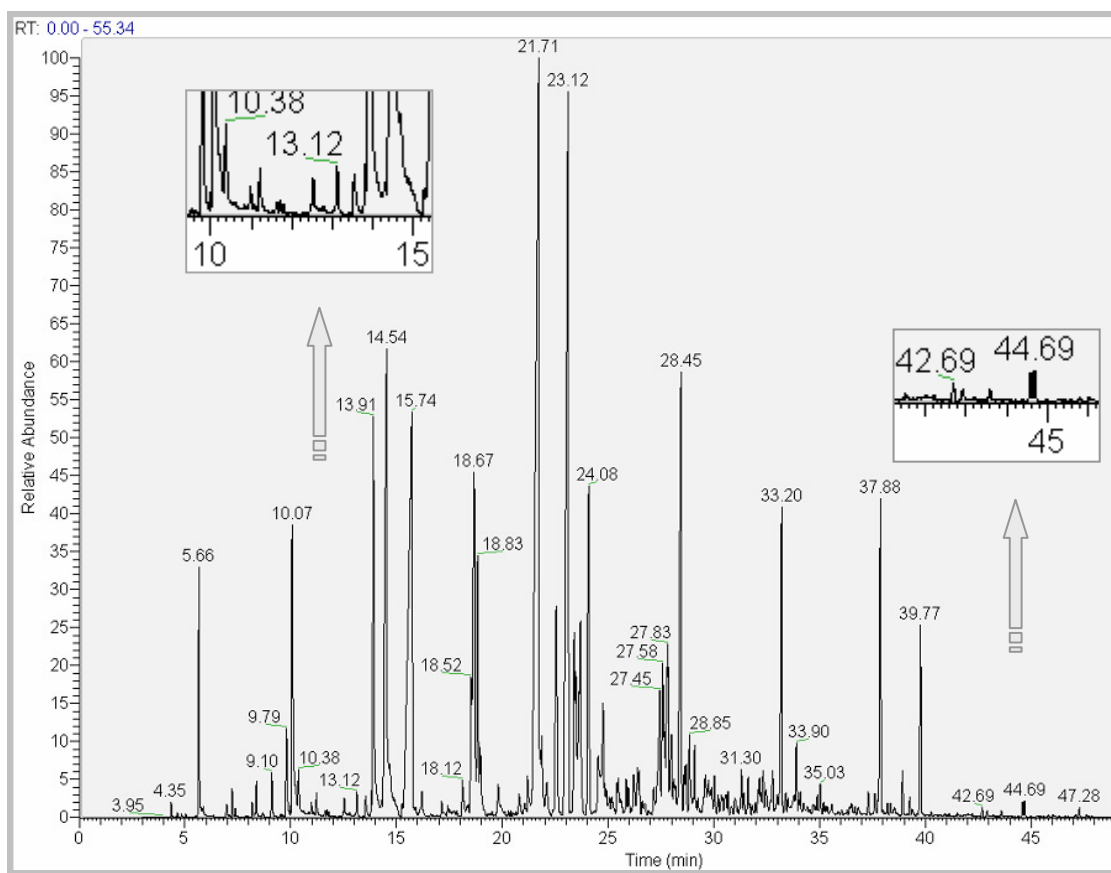


Abbildung 18 Chromatogramm: Kaffeegetränk *Robusta Madagaskar*; 24-Stunden-Messung mittels HS-SPME

Tabelle 13 fasst die wichtigsten Aromastoffe des *Robusta Madagaskar* Kaffeegetränks zusammen, die mittels HS-SPME „gesammelt“ und unter Verwendung des GC-MS aufgezeichnet und registriert wurden.

**Tabelle 13** Geruchspotente Aromastoffe im Robusta Madagaskar Kaffeegetränk,  
24-Stunden Messung mittels HS-SPME-GC-MS

Nr.	R <sub>t</sub> (min)	Geruchsstoff*	Synonym	Geruchseindruck <sup>‡</sup>
1	5,66	2-Methylfuran		schokoladeartig
2	6,98	2-Methylbutanal		malzig
3	9,10	Propionsäure		ranzig
4	10,07	Pyridin	Azin, Azabenzol	unangenehm
5	10,97	Toluol	Methylbenzol	blumig-stechend
6	12,13	Valeriansäure	Pentansäure	schweißig
7	12,15	Buttersäure	Butansäure	schweißig
8	12,53	Hexanal	Capronaldehyd	fettig-grün
9	12,59	2,3-Pentandion	Acetylpropionyl	nach Butter
10	13,12	Sotolon	3-Hydroxy-4,5 dimethyl-2(5H)furanon	röstig, würzig, nach Karamell
11	13,91	Dimethylpyrazin		röstig
12	14,54	Furfural	Furancarboxyaldehyd	bittermandelartig
13	14,64	2-Ethyl-3,5-dimethylpyrazin		erdig, röstig
14	14,75	2,3-Diethyl-5-methylpyrazin		erdig, röstig
15	15,74	2-Furfurylalkohol	2-Furanmethanol	stechend
16	17,62	3-Methylbuttersäure	Isovaleriansäure	schweißig
17	18,67	Acetylfuran	2-Furylmethylketon	süß, balsamisch
18	21,71	5-Methylfurfural	5-Methylcarboxaldehyd	bittermandelartig
19	21,81	Benzaldehyd	Benzcarbaldehyd	bittermandelartig
20	22,09	2-Methylfuroat	Methyl-2-furancarboxylat	fruchtig, nach Pilze
21	22,68	2-Octanon	Hexylmethylketon	nach Apfel, blumig, grün
22	23,12	2-Furfurylacetat		fruchtig
23	24,92	Acetylpyrazin		nach Popcorn
24	25,48	Acetylpyridin		nach Weißbrotkruste
25	26,46	Methylphenol	Kresol	rauchig
26	27,45	2-Acetyl-3,4-dihydro-5H-pyrrol		nach Weißbrotkruste
27	27,58	Vanillin	4-Hydroxy-3-methoxybenzaldehyd	nach Vanille
28	27,83	Methanthiol		muffig
29	28,45	o-Guajakol	2-Methoxyphenol	rauchig, phenolisch, süß
30	30,85	3-Isopropyl-2-methoxypyrazin		erbsig
31	32,22	3-Isobutyl-2-methoxypyrazin		erbsig
32	33,20	Furfurylpyrrol		
33	35,03	2-Furfurylthiol		röstig, nach Kaffee
34	37,88	Ethylguajakol	2-Methoxy-4-ethylphenol	süß, phenolisch, brenzlich
35	38,43	2-Methylisoborneol	MIB	muffig, erdig
36	38,82	Trimethylpyrazin		erdig, röstig
37	39,77	Vinylguajakol	2-Methoxy-4-vinylphenol	rauchig, nach Nelke
38	40,39	Eugenol	2-Methoxy-4-allylphenol	würzig, nach Nelke
39	42,69	β-Damascenon		gekochter Apfel, rosig
40	44,69	Skatol	3-Methylindol	fäkalartig, (blumig)
41	45,98	Isoeugenol	2-Methoxy-4-propanylphenol	nach Nelke

\* Übereinstimmung in NIST und WILEY: > 80 %, <sup>‡</sup> Literatur siehe Text

Im Chromatogramm (Abbildung 18) des *Robusta* Kaffeegetränk wurden etwa 290 Kaffeearomastoffe aufgezeichnet, welche in die Verbindungsklassen nach *Nijssen et al.* (1996) eingeteilt werden können [NIJSSEN et al., 1996]. Vergleicht man das Chromatogramm des *Robusta*-Kaffeegetränks mit dem der Rohbohne, kann man optisch schon deutliche Unterschiede feststellen. Allerdings finden sich zum Teil die detektierten Substanzen vom Rohkaffee-Chromatogramm wieder, jedoch mit deutlichen Konzentrations- bzw. Intensitätsunterschieden. Diese Veränderung ist auf den Röstvorgang, durch entsprechende Um- und Abbau-Reaktionen zurückzuführen. Somit verlieren oder gewinnen einzelne flüchtige Verbindungen an Bedeutung.

Zum Beispiel stellt der **Furfurylalkohol** (15) im Rohkaffee den Peak mit höchster Intensität dar, dieser ist im Kaffeegetränk bei  $R_t$  15.74 mit wesentlich geringerer Intensität zu finden. Das nach Bittermandel riechende **Furfural** (12) ist mit etwas geringerer Intensität als bei der Rohbohne bei  $R_t$  14.54 nachgewiesen worden. Das heißt, es ist als Aromakomponente nicht mehr so dominant wie im Aromaprofil der Rohbohne. Das **5-Methylfurfural** (18) stellt im Chromatogramm des *Robusta*-Getränks den höchsten Peak ( $R_t$  21.71) dar. Diese Substanz mit Bittermandelnote nimmt während des Röstvorgangs deutlich zu. Der zweithöchste Peak im Chromatogramm des Röstkaffees ist das mit fruchtiger Note charakterisierte **Furfurylacetat** (22) bei einer Laufzeit von 23.12 Minuten. Auffallend ist auch der relativ hohe Peak am Anfang des Chromatogramms bei einer Retentionszeit von 5.66. Hier wurde **2-Methylfuran** (1), eine nach Schokolade riechende Verbindung, detektiert. Furan-Verbindungen kommen vor allem in erhitzten Lebensmitteln vor, wesentlich in geröstetem Kaffee [BELITZ et al., 2008]. Bei einer  $R_t$  von 18.67 ist das **Acetylfuran** (17), ein heterocyclisches Keton, aufgezeichnet worden. Diese Furanverbindung weist ein süß-balsamisches Aroma auf [BAUER et al., 1997]. Das **Furfurylpyrrol** (32) bei einer Laufzeit von 33.20 ist ein Produkt der *Maillard*-Reaktion, es wurde auch schon im Rohkaffee – mit deutlich geringerer, fast unscheinbarer Intensität, bei  $R_t$  32.99 – nachgewiesen [BELITZ et al., 2008]. Ein weiteres Furan, das **2-Methylfuroat** (20), welches in geringen Konzentrationen in Röstkaffee vorkommt, weist ein fruchtiges-pilzähnliches

Aroma auf und konnte bei  $R_t$  22.09 detektiert werden [BAUER et al., 1997]. Furanverbindungen entstehen beim Erhitzen von kohlenhydratreichen Lebensmitteln aus Mono- und Disacchariden unter sauren Bedingungen, welche beim Röstvorgang gegeben sind. Das im Kaffeegetränk enthaltene **Sotolon** (10), welches bei  $R_t$  13.12 qualifiziert wurde ist im Rohkaffee nur in Spuren enthalten; die Konzentration steigt während des Röstvorgangs enorm an [CZERNY und GROSCH, 2000]. Außerdem ist der Gehalt in den *Arabica*-Sorten höher, so die Autoren *Semmelroch* und *Grosch*. Sotolon, mit typischem Würzaroma, entsteht bei der *Maillard*-Reaktion aus Diacetyl, jenes konnte im *Robusta*-Kaffeegetränk nicht mehr nachgewiesen werden [SEMMELOCH und GROSCH, 1996; BELITZ et al., 2008].

Das **2-Furfurylthiol** (33) charakterisiert durch seine röstige – an Kaffee erinnernde – Aromanote, wurde bei einer Laufzeit von 35.03 aufgezeichnet. In der Literatur wird 2-Furfurylthiol auch als „character impact compound“ des Kaffees beschrieben. In *Robusta*-Sorten ist die Konzentration um etwa das Zweifache höher als bei *Arabica*-Sorten. Das röstige Aroma von 2-Furfurylthiol kommt aufgrund der strengen erdigen und rauchigen Noten des *Robustas* nicht wesentlich zum Vorschein. Die Ausbeute bei der Bereitung eines Kaffeegetränks beträgt für 2-Furfurylthiol nur 19% [GROSCH und SEMMELOCH, 1996; MAYER et al., 2000]. **Methanthiol** (28), welchen in hoher Konzentration eine muffige Note aufweist, wurde bei  $R_t$  27.83 detektiert. Methanthiol ist in geringer Konzentration ein natürliches Röstprodukt in Kaffee. Es konnte jedoch nur im *Robusta*-Getränk nachgewiesen werden, welches unter Umständen auch für die schlechte Qualität spricht. Unter den leicht flüchtigen Kaffeearomakomponenten verdampft Methanthiol am schnellsten. Der Verlust beträgt bei einer Lagerung von 30 Minuten bereits 66%. Auch die Ausbeute bei der Zubereitung des Getränks ist sehr hoch und liegt bei etwa 70% [MAYER et al., 2000; BELITZ et al., 2008].

Die Phenole **Guajakol** ( $R_t$  28.45, 29) und seine Abkömmlinge **Ethyl-** und **Vinylguajakol** ( $R_t$  37.88; 34 und  $R_t$  39.77; 37) sind in *Robusta*-Sorten in deutlich höheren Konzentration vertreten als bei den qualitativeren *Arabica*-Sorten (siehe Tabelle 9 und Tabelle 10; 2.10.4). Sie gelten als

Schlüsselaromastoffe für *Robusta*-Kaffee und prägen *Robustas* mit ihrer unangenehmen rauchig/phenolischen Note [BELITZ et al., 2008]. Im *Robusta*-Getränk ist der Gehalt an Guajakol, Ethyl- und Vinylguajakol um das Vier- bis Zehnfache höher, verglichen mit dem *Arabica*-Getränk [SEMMELECH und GROSCH, 1996]. Die Konzentrationen dieser phenolischen Verbindungen nehmen während des Röstvorgangs immens zu. Tabelle 7 (2.10.1) gibt Auskunft über die Konzentrationserhöhung während des Röstvorgangs [CZERNY und GROSCH, 2000]; dieser Anstieg spiegelt sich in der Intensität der Peaks im Chromatogramm der Röstbohne wieder und ist auch das augenmerklichste Indiz des minderwertigen *Robusta Madagaskar*. **Kresol** (25), mit seinem rauchigen Aromaprofil, wurde bei  $R_t$  26.46 detektiert; es gilt als natürliche Aromakomponente im Röstkaffee, vor allem in *Robusta*-Sorten. Das im Röstkaffee enthaltene **Eugenol** (38) weist ein würziges, nach Nelken riechendes Aroma auf; es wurde mit schwacher Intensität bei einer Laufzeit von 40.39 Minuten nachgewiesen. Dieses Phenolderivat kommt natürlich in vielen Obstsorten vor und wird in der Aromaindustrie vielfach eingesetzt [ROTH und KORMANN, 1997; BELITZ et al., 2008]. Das **Isoeugenol** (41) oder 2-Methoxy-4-propenylphenol weist als Reinsubstanz ebenso einen nelkenähnlichen Geruch auf; es wurde bei  $R_t$  45.98 detektiert [BAUER et al., 1997]. Im eher unangenehmen Gesamtroma des *Robusta*-Getränks überwiegen die würzigen und rauchigen Aromanoten, die sich auf Phenole zurückführen lassen.

Im Chromatogramm, bei einer  $R_t$  von 10.97, kam es zur Detektion von **Toluol** (5), es weist als Reinsubstanz einen brennenden und etwas blumigen Geruch auf.

Bei einer Retentionszeit von 14.64 und 14.75 wurden zwei Pyrazine detektiert, die in der Literatur als erdig-röstig riechende Aromaträger beschrieben werden. Die flüchtigen Pyrazine entstehen vor allem beim Erhitzen von Lebensmitteln. **2-Ethyl-3,5-dimethylpyrazin** (13) und **2,3-Diethyl-5-methylpyrazin** (14) hatten bei gaschromatographisch-olfaktometrischen Untersuchungen die niedrigsten Geruchsschwellen, die für Alkylpyrazine bisher gemessen wurden, erreicht. Diese zwei Alkylpyrazine entstehen während des Röstvorgangs – vor allem in *Robusta*-Sorten in höheren Konzentrationen als

andere Pyrazine und gelten zudem als Schlüsselaromastoffe in *Robusta*-Sorten (siehe Tabelle 9; 2.10.4). Ein optimales Verhältnis von Konzentration zur Geruchsschwelle führt dazu, dass die Aromaaktivitäten von 2-Ethyl-3,5-dimethylpyrazin und 2,3-Diethyl-5-methylpyrazin die der anderen Alkylpyrazine überragen [SEMMELOCH und GROSCH, 1995; BELITZ et al., 2008]. Die Extraktionsausbeute bei der Zubereitung des Kaffeegetränks liegt zwischen 70 und 80%. Das **Acetylpyrazin** (23) bei einer  $R_t$  von 24.92 weist einen Geruch nach geröstetem Mais auf und zeigt eine relativ hohe Geruchsschwelle (62 µg pro Liter Wasser) [MAYER et al., 2000; BELITZ et al., 2008]. Ein Peak mit sehr hoher Intensität bei 13.91 stellt das **Dimethylpyrazin** (11) dar. Es weist eine röstige-nussartige Geruchsnote auf und ist im Röstkaffee als natürlicher Aromastoff enthalten [BAUER et al., 1997]. Bei einer Retentionszeit von 38.82 Minuten wurde das **Trimethylpyrazin** (36) detektiert. Die Geruchsschwelle von Trimethylpyrazin liegt sehr viel höher als bei Substanz 30 und 31, jedoch entsteht beim Röstvorgang Trimethylpyrazin in wesentlich höheren Konzentrationen und kompensiert so seine „Aromaschwäche“. Beim Übergang von Dimethylpyrazin zum Trimethylpyrazin verändert sich die Geruchsqualität von nussartig nach erdig röstig [BAUER et al., 1997; BELITZ et al., 2008]. Die schon im *Robusta*-Rohkaffee detektierten Methoxypyrazine **3-Isopropyl-2-methoxypyrazin** (30) und **3-Isobutyl-2-methoxypyrazin** (31) tauchen beim *Robusta*-Kaffeegetränk bei  $R_t$  30.85 und  $R_t$  32.22 auf. Die Konzentrationen dieser beiden Methoxypyrazine verändern sich während des Röstvorgangs nicht wesentlich, da es sich um sehr stabile Verbindungen handelt. Die Extraktionsausbeute dieser beiden Pyrazine beträgt bei der Herstellung eines Kaffeegetränks etwa 25% [MAYER et al., 2000; BELITZ et al., 2008].

Zu den flüchtigen Verbindungen, die beim Rösten von Kaffee entstehen, gehören zahlreiche Pyrrol- und Pyridin-Abkömmlinge. Bei  $R_t$  25.48 wurde **Acetylpyridin** (24) und bei  $R_t$  27.45 **2-Acetyl-3,4-dihydro-5H-pyrrol** (26) detektiert. Beide N-Heterocyclen weisen einen Geruch nach Weißbrotkruste auf [BAUER et al., 1997]. Voraussetzung für das Auftreten von Röstgeruch scheint in diesem Fall das Strukturmerkmal einer Alkanoylgruppe ( $-N=C-C=O-R$ ) zu sein [BELITZ et al., 2008].

Ein Peak mit relativ hoher Intensität bei 27.58 Minuten stellt **Vanillin** (27), ein Phenolaldehyd, dar. Vanillin ist im Rohkaffee in Spuren enthalten, konnte aber im Rahmen dieser Arbeit nicht detektiert werden, da die Konzentration im Rohkaffee zu gering ist (siehe Tabelle 7; 2.10.2). Das mit einem typischen Vanillegeruch ausgestattete Vanillin ist in *Robusta*-Sorten etwa dreimal mehr enthalten wie in *Arabica*-Sorten [SEMMELOCH und GROSCH, 1996; MARTINETZ und HARTWIG, 1998]. Das erklärt sich dadurch, dass Vanillin als Nebenprodukt bei der Pyrolyse von Ferulasäure gebildet wird und Ferulasäure in *Robusta*-Sorten in deutlich höherer Konzentration vorhanden ist. Die Extraktionsausbeute bei der Herstellung eines Kaffeegetränks ist sehr hoch und beträgt 95% [MAYER et al., 2000].

Das bereits im *Robusta*-Rohkaffee detektierte **2-Methylisoborneol** (MIB; 35) wurde auch im *Robusta*-Kaffeegetränk bei  $R_t$  38.43 nachgewiesen. MIB ist mit seinem erdig-muffigen Aroma charakteristisch für den minderwertigen *Robusta* und somit in signifikant höheren Konzentrationen als in *Arabica*-Sorten enthalten. Die Autoren *Blank* und *Grosch* (2002) ermittelten Werte von 185 bis 430 ppt MIB in *Robusta*-Röstkaffee und nur 20 ppt in gerösteten *Arabica*-Sorten; bezogen auf die Trockensubstanz. Methylisoborneol gilt im *Robusta*-Kaffee als Schlüsselaromasubstanz [BLANK und GROSCH, 2002; NAKAMURA et al., 2005]. Im Rahmen dieser Arbeit konnten nur in *Robusta*-Rohkaffee und Getränk 2-Methylisoborneol nachgewiesen werden; in den beiden nachfolgenden *Arabica*-Sorten kam es nicht zur Detektion.  **$\beta$ -Damascenon** (39), welches im Chromatogramm bei 42.69 Minuten detektiert wurde, ist laut *Semmelroch* und *Grosch* (1996) eine Schlüsselaromakomponente in *Robusta*- und *Arabica*-Sorten [SEMMELOCH und GROSCH, 1996]. Die Konzentration ist in beiden Varietäten etwa gleich bei 1.5  $\mu\text{g}$  pro Liter Kaffeegetränk. Die Intensität im Chromatogramm des *Robusta*-Getränks ist im Gegensatz zum Chromatogramm der Rohbohne deutlich angestiegen. Das an gekochtem Apfel – mit leichter Rosennote – erinnernde  $\beta$ -Damascenon nimmt beim Röstvorgang enorm zu und steigt von 0.3 auf 255  $\mu\text{g}$  pro Kilogramm Roh- bzw. Röstkaffee – jedoch ist die Ausbeute bei der Herstellung eines Kaffeegetränks nur 11% [CZERNY und GROSCH, 2000; MAYER et al., 2000]. Bei  $R_t$  44.69 wurde



wiederum **Skatol** (40) oder 3-Methylindol, welches in hoher Verdünnung einen blumigen Geruch aufweist, erfasst.

Bei einer Laufzeit von 22.68 Minuten wurde **2-Octanon** (21) detektiert. Dieses Methylketon weist eine nach Apfel riechende, grün-blumige Geruchsnote auf [ROTH und KORMANN, 1997; BELITZ et al., 2008]. Das nach Butter riechende **2,3-Pentandion** (9) wurde im Chromatogramm bei einer Laufzeit von 12.59 Minuten detektiert. Es ist in *Robusta*-Sorten in geringeren Konzentrationen enthalten als in *Arabica*-Sorten; die Extraktionsausbeute beträgt 85% [SEMMEYROCH und GROSCH, 1996; MAYER et al., 2000].

Das *Strecker*-Aldehyd **2-Methylbutanal** (2) bei  $R_t$  6.98, besitzt ein malziges Aroma. Die Ausbeute dieses Aromastoffs beträgt bei der Herstellung eines Kaffeegetränks etwa 60% [MAYER et al., 2000; BELITZ et al., 2008]. Die Geruchsqualität von **Hexanal** (8), einem weiteren *Strecker*-Aldehyd, welches bei  $R_t$  12.53 detektiert wurde ist fettig-ölig und grün [MARTINETZ und HARTWIG, 1998; BELITZ et al., 2008]. Das bittermandelartige **Benzaldehyd** (19) ist bei  $R_t$  21.81 nachgewiesen worden und gilt als natürlicher Aromastoff in Kaffee [NIJSSEN et al., 1996].

Bei  $R_t$  9.10 ist **Propionsäure** (3) aufgezeichnet worden. Diese Säure besitzt eine ranzige Geruchsnote und spricht wohl eher für minderwertige *Robusta*-Sorten [ROTH und KORMANN, 1997]. Drei Säuren mit schweißiger Geruchsqualität wurden bei  $R_t$  12.13 **Valeriansäure** (6),  $R_t$  12.15 **Buttersäure** (7) und  $R_t$  17.62 **3-Methylbuttersäure** (16) aufgezeichnet. Diese drei Säuren gelten, trotz des eher unangenehmen Geruchsempfindens als Aromakomponenten im Kaffee. Bei einer Laufzeit von 10.07 konnte wiederum das eher unangenehm riechende **Pyridin** (4), welches schon im Rohkaffee aufgefunden wurde, detektiert werden. Zudem wurden einige Schwefelverbindungen sowie Oxazole und Pyran-Verbindungen aufgezeichnet, die sich gleichfalls in der Liste von *Nijssen et al.* (1996) befinden [NIJSSEN et al., 1996].

### 4.1.3. Qualitative Auswertung des *Arabica Santos* Kaffeegetränk

Allgemein lässt sich sagen, dass sich *Arabica*-Kaffee in der Aromakonstellation deutlich von der des *Robusta*-Kaffees unterscheidet. Die wesentlichen Merkmale liegen dabei in den deutlich höheren Gehalten an süß-karamellartigen Aromanoten. Zudem dominieren im *Arabica*-Getränk die erbsig-grünen und butterartig riechenden Aromagruppen. Einen wesentlichen Beitrag dazu liefern Furanone und Diketone [BELITZ et al., 2008].

Ein sortenreiner *Arabica Santos*-Kaffee lässt sich durch seinen äußerst geringen Säuregehalt und milden Geschmack beschreiben. Dieser brasilianische *Santos* unterscheidet sich vom *Arabica Sidamo* unter anderem in seinem Aufbereitungsschema; er wurde trocken aufbereitet und somit nicht fermentiert.

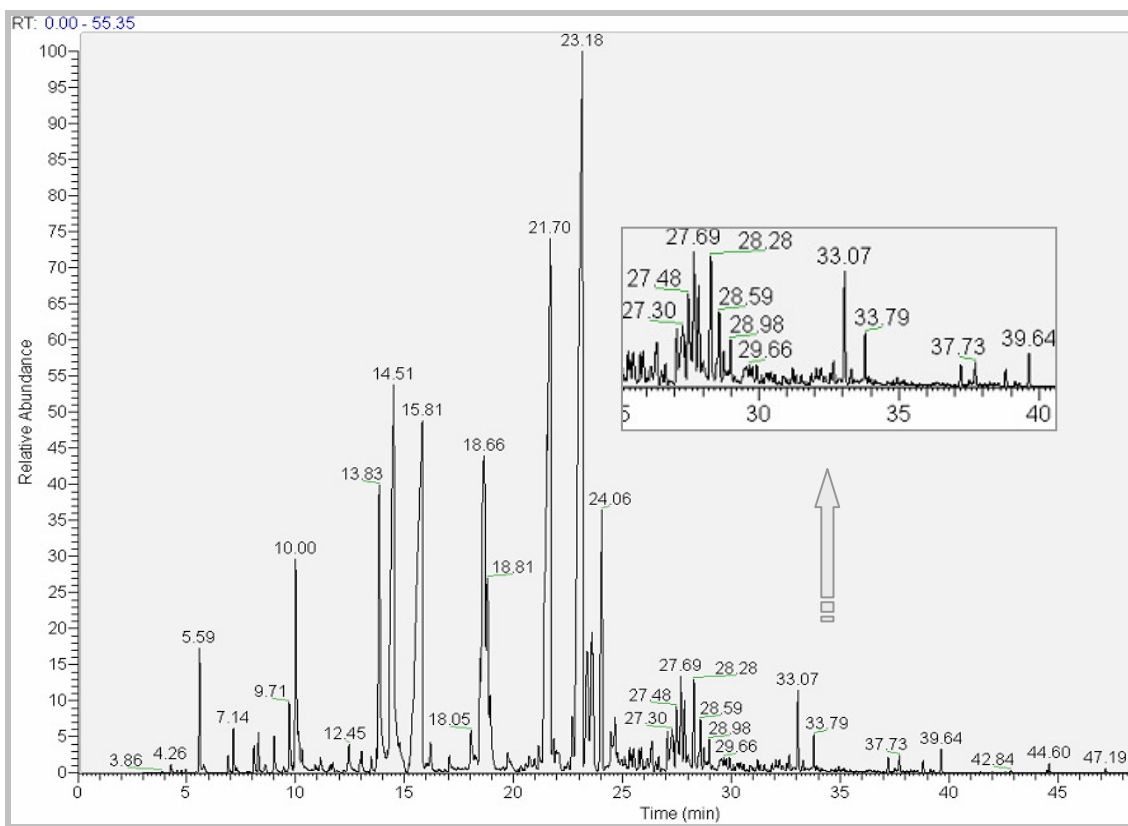


Abbildung 19 Chromatogramm: Kaffeegetränk *Arabica Santos*;  
24-Stunden-Messung mittels HS-SPME

---

In Tabelle 14 sind die wichtigsten Aromastoffe, die unter anderem das charakteristische Aroma des *Arabica Santos* ausmachen, zusammengefasst.

**Tabelle 14** Geruchspotente Aromastoffe im Arabica Santos Kaffeegetränk,  
24-Stunden Messung mittels HS-SPME-GC-MS

Nr.	R <sub>t</sub> (min)	Geruchsstoff*	Synonym	Geruchseindruck <sup>¥</sup>
1	4,26	Furan		
2	5,55	2-Methylfuran		schokoladeartig
3	5,59	3-Methylfuran		schokoladeartig
4	5,89	Essigsäure	Ethansäure	nach Essig
5	6,18	Methylpropanal		malzig
6	6,89	3-Methylbutanal	Isovaleral	malzig, apfelähnlich
7	7,14	2-Methylbutanal	2-Methylbutyraldehyd	malzig
8	7,76	2-Pentanon	Ethylacetone	fruchtig, nach Banane
9	8,09	2,3-Pentandion	Acetylpropionyl	butterartig
10	10,00	Pyridin	Azin, Azabenzol	unangenehm
11	11,05	Ethylfuraneol	4-Hydroxy-2-ethyl-5-methyl-3(2H)-furanon	fruchtig, nach Karamell
12	12,30	Diacetyl	2,3-Butandion	butterartig
13	12,86	Abhexon	3-Hydroxy-5-ethyl-4-methyl-2(5)-furanon	röstig, würzig, nach Karamell
14	12,95	Sotolon	3-Hydroxy-4,5-dimethyl-2(5H)-furanon	röstig, würzig, nach Karamell
15	13,83	Dimethylpyrazin		röstig
16	14,51	Furfural	Furancarboxyaldehyd	bittermandelartig
17	15,81	2-Furfurylalkohol	2-Furanmethanol	stechend
18	16,40	2-/3-Methylbuttersäure-ethylester		fruchtig
19	17,80	2-Methylbuttersäure		schweißig
20	17,91	3-Methylbuttersäure	Isovaleriansäure	schweißig
21	18,47	Acetylfuran	2-Furylmethylketon	süß, balsamisch
22	18,66	2-Methylpyrazin		röstig-nussig
23	20,58	Furaneol	4-Hydroxy-2,5-dimethyl-3(2H)-furanon	fruchtig, nach Karamell
24	21,70	5-Methylfurfural	5-Methylcarboxaldehyd	bittermandelartig
25	22,35	Isomaltol	Hydroxyacetylfuran	süß
26	23,18	2-Furfurylacetat		fruchtig
27	24,06	2-Formylmethylpyrrol	1-Methylpyrrole-2-carboxaldehyd	
28	24,76	Acetylpyrazin		nach Popcorn
29	25,40	Acetylpyridin		nach Weißbrotkruste
30	26,12	Ethanal	Acetaldehyd	stechend, fruchtig
31	27,48	2-Ethenyl-3,5-dimethylpyrazin		erdig, röstig
32	27,69	2-Furfurylmethan	2,2'-Difurylmethan	
33	28,28	o-Guajakol	2-Methoxyphenol	rauchig, phenolisch, süß
34	28,59	Acetylthiazol		nach Popcorn
35	32,51	3-Isobutyl-2-methoxypyrazin		erbsig
36	33,07	Furfurylpyrrol		
37	34,93	2-Furfurylthiol		röstig, nach Kaffee
38	37,73	Ethylguajakol	2-Methoxy-4-ethylphenol	süß, phenolisch, brenzlich
39	39,64	Vinylguajakol	2-Methoxy-4-vinylphenol	rauchig, nach Nelke
40	42,84	β-Damascenon		gekochter Apfel, rosig

\* Übereinstimmung in NIST und WILEY: > 80 %, ¥ Literatur siehe Text

Das Chromatogramm des *Arabica Santos* (Abbildung 19) zeigt etwa 310 Aromastoffe, die sich wiederum in der Aromaliste nach *Nijssen et al.* (1996) einteilen lassen [NIJSEN et al., 1996]. Es wurden auffallend viele Furanon-Verbindungen detektiert, diese tragen großteils zum röstigen und karamellartigen Aroma des *Santos* bei. Diese für das Aromaprofil angenehmen Furanone sind in *Arabica*-Sorten um ein Vielfaches mehr enthalten als in *Robusta*-Varietäten [BELITZ et al., 2008]. Vergleicht man das *Santos*-Chromatogramm mit dem des *Robusta*-Kaffees, sind vor allem im letzten Bereich (ab  $R_t$  28.00) deutliche Differenzen feststellbar. Die hohen Peaks, die im letzten Abschnitt des *Robusta*-Kaffeegetränks detektiert wurden, sind im Chromatogramm des *Arabica Santos* augenmerklich verschwunden.

Im Chromatogramm des *Robusta*-Getränks wurden zwischen  $R_t$  28.00 und 40.00 die Guajakole mit entsprechend hoher Intensität, detektiert. Diese Guajakole wurden beim *Arabica Santos* auch nachgewiesen, jedoch mit wesentlich geringerer Intensität. Das **Guajakol** (33) bei  $R_t$  28.28, das **Ethylguajakol** (38) bei  $R_t$  37.73 und das **Vinylguajakol** (39) bei  $R_t$  39.64 sind in den *Arabica*-Sorten in wesentlich geringeren Konzentrationen enthalten. Der Gehalt im Kaffeegetränk ist von Guajakol um das 7-fache, die des Vinylguajakol um das 3-fache und die des Ethylguajakol um das 12-fache geringer, verglichen mit *Robusta*-Kaffee (vergleiche dazu Tabelle 10; 2.10.4) [SEMMELOCH und GROSCH, 1996]. Diese drei Phenole, mit ihrer unangenehmen Geruchsqualität, wirken sich in diesen Konzentrationen nicht mehr, wie es beim *Robusta*-Kaffee der Fall ist, negativ auf das Gesamtaroma aus.

Den Peak mit höchster Intensität im Chromatogramm stellt die im Geruch fruchtige Furanverbindung, das **2-Furfurylacetat** (26), bei einer Laufzeit von 23.18 Minuten dar. Ebenfalls mit sehr hoher Intensität bei  $R_t$  21.70 kam es zur Detektion des bittermandelartig riechenden **5-Methylfurfural** (24). Das **Isomaltol** (25), eine Furanverbindung mit süßem Aroma, wurde zwischen den beiden höchsten Peaks bei  $R_t$  22.35 nachgewiesen. Es entsteht infolge einer Dehydratisierungsreaktion beim Erhitzen von Monosacchariden – bevorzugt aus Fructose – unter sauren Bedingungen, welche beim Röstvorgang gegeben sind. Bei einer Retentionszeit von 14.51 Minuten wurde das gleichfalls nach

Bittermandel riechende **Furfural** (16) nachgewiesen. Furfural entsteht beim Zerfall von 3-Desoxypentosen und gilt bei thermischer Behandlung als Vorläufer einiger Furan- und Thiophen-Derivate. Außerdem disproportioniert Furfural leicht unter Bildung von Furfurylalkohol und Furancarbonsäuren [BELITZ et al., 2008]. Gefolgt im Chromatogramm wird Furfural von dem „brennend“ riechendem **Furfurylalkohol** (17), mit einer etwas geringeren Intensität, bei einer Laufzeit von 15.81 Minuten [ROTH und KORMANN, 1997]. Am Anfang des Chromatogramms wurden drei Furanverbindungen detektiert. Bei  $R_t$  4.26 kam es zur Aufzeichnung von **Furan** (1) und dessen schokoladeartig riechenden **2- und 3-methylsubstituierten Derivate** ( $R_t$  5.55; 2 und  $R_t$  5.59; 3). Furan ist in vielen erhitzten Lebensmitteln als flüchtiges Hauptprodukt der Karamellisierung nachgewiesen worden, vor allem in geröstetem Kaffee [BELITZ et al., 2008]. Bei  $R_t$  18.47 wurde eine weitere Furanverbindung – das **Acetylfuran** (21) – nachgewiesen. Acetylfuran mit seiner süß-balsamischen Aromanote wurde auch im *Robusta*-Kaffeegetränk entdeckt [BAUER et al., 1997]. Im Chromatogramm des *Arabica Santos*-Kaffee kam es zur Detektion zweier weiterer Furanverbindungen, **2-Furfurylmethan** ( $R_t$  27.69; 32) und **Furfurylpyrrol** ( $R_t$  33.07; 36) – beide kommen natürlicherweise im Kaffeearoma vor [NIJSSEN et al., 1996].

Außerdem wurden einige Furanone nachgewiesen. Diese sind Folgeprodukte der *Maillard*-Reaktion und entstehen im Verlauf der Röstung beim Abbau von Kohlenhydraten. Die resultierenden 3(2H)- und 2(5H)-Furanone sind charakteristische Aromastoffe des Röstkaffees bzw. des Kaffeegetränks [BELITZ et al., 2008]. Bei einer Retentionszeit von 12.86 und 12.95 wurden die 2(5H)-Furanone **Abhexon** (13) und **Sotolon** (14) qualifiziert. Beide Hydroxyfuranone weisen eine würzig-röstige, nach Karamell riechende Aromaqualität auf [STEGELICH et al., 2000]. Die Konzentrationen im *Arabica*-Getränk sind um das Zweifache höher als im *Robusta*-Getränk [SEMMELOCH und GROSCH, 1996]. In einer Arbeit von *Teutsch* (2004) konnte bezüglich des Verdünnungsfaktors dieser beiden Aromastoffe kein Unterschied im Getränk zwischen nass und trocken aufbereitetem Röstkaffee nachgewiesen werden [TEUTSCH, 2004]. Die Extraktionsausbeute bei der Herstellung eines

Kaffeegetränks beträgt für Sotolon etwa 80% [MAYER et al., 2000]. Im Chromatogramm bei  $R_t$  11.05 und  $R_t$  20.58 wurden zwei 3(2H)-Furanone detektiert; **Ethylfuraneol** (11) und **Furaneol** (23). Beide Furanonverbindungen sind charakterisiert durch ihre etwas fruchtig-süße und sehr intensive Karamellnote [STEGLICH et al., 2000; BELITZ et al., 2008]. Diese beiden Hydroxyfuranone sind im *Arabica*-Kaffee in etwa doppelt so hoher Konzentration enthalten wie in *Robusta*-Sorten und prägen das süß-karamellige Aroma des *Arabica Santos* (siehe Tabelle 10; 2.10.4) [SEMMELOCH und GROSCH, 1996]. Ethylfuraneol und Furaneol weisen, genauso wie Sotolon und Abhexon, hohe Verdünnungsfaktoren auf; es wurden auch hier keine Unterschiede zwischen gewaschenem und ungewaschenem Röstkaffee nachgewiesen. Die Ausbeute bei der Zubereitung eines Kaffeegetränks ist für beide Furanonverbindungen sehr hoch und beträgt etwa 95% [MAYER et al., 2000]. Beim *Arabica Santos* wurden auffällig viele Furanone aufgezeichnet; diese sind in *Arabica*-Sorten grundsätzlich konzentrierter und geben dem hochwertigen *Santos* auch das typisch röstig-karamellartige und leicht würzige Aroma.

Am Anfang des *Santos*-Chromatogramms wurden drei Carbonylverbindungen aufgezeichnet, die wesentlich zum Kaffee Aroma beitragen. Bei  $R_t$  6.18 kam es zur Detektion von **Methylpropanal** (5) und bei  $R_t$  6.89 und  $R_t$  7.14 wurden **3-Methylbutanal** (Isovaleral; 6) und das 2-Isomer **2-Methylbutanal** (7) detektiert. Allen Dreien ist das malzige Aromaprofil gemein, wobei dem Isovaleral in der Literatur zusätzlich ein apfelähnliches Aroma zugeschrieben wird [ROTH und KORMANN, 1997; BELITZ et al., 2008]. Die Extraktionsausbeute dieser drei Aromastoffe liegt bei etwa 60% [MAYER et al., 2000]. Die Konzentrationen dieser *Strecker*-Aldehyde sind in *Arabicas*, laut den Autoren Semmelroch und Grosch, deutlich geringer. Bei einer Untersuchung von *Teutsch* durch AEVA wurden für 2- und 3-Methylbutanal im Kaffeegetränk eines trocken aufbereiteten Röstkaffees um jeweils zwei Verdünnungsstufen höhere FD-Faktoren detektiert. Außerdem stellte *Teutsch* fest, dass bei der Herstellung eines Kaffeegetränks aus ungewaschenem Röstkaffee 30 bis 40% höhere Gehalte für 2- und 3-Methylbutanal vorlagen. Im Rahmen seiner Untersuchung

hat *Teutsch* per HVA weitere geruchsaktive Verbindungen, die die Differenzen eines Kaffeegetränks eines gewaschenen und ungewaschenen Röstkaffees ausmachen, festgestellt. Dabei trug Methylpropanal, dessen FD-Faktor beim Kaffeegetränk der trocken aufbereiteten Röstbohnen um einiges höher war, eine tragende Rolle (siehe Tabelle 11; 2.10.5) [TEUTSCH, 2004]. Bei  $R_t$  26.12 wurde **Acetaldehyd** (30) nachgewiesen. Dieser *Strecker*-Aldehyd mit fruchtig-stechendem Geruch verdampft relativ schnell und zählt somit zu einer der flüchtigsten Aromastoffe im Kaffeegetränk. Die Ausbeute bei der Herstellung des Kaffeegetränks liegt für Acetaldehyd bei 73% [MAYER et al., 2000; BELITZ et al., 2008]. Einen Peak mit hoher Intensität stellt **2-Formylmethylpyrrol** ( $R_t$  24.06; 27) dar; es wird in der Literatur als Kaffeearomasubstanz beschrieben [NIJSEN et al., 1996].

**Methylbuttersäureethylester** (18), deren Isomere hier nicht eindeutig identifiziert wurden, konnte bei einer Laufzeit von 16.40 nachgewiesen werden. Beide Isomere weisen ein fruchtiges Aromaprofil auf. Die Verbindungen sind ausgesprochen hitzestabil und überstehen ohne weiteres den Röstvorgang; wobei das 2-Isomer stabiler ist [CZERNY und GROSCH, 2000]. 2- und 3-Methylbuttersäureethylester geben in allen Analysen von *Teutsch* den maßgeblichen Unterschied zwischen nasser und trockener Aufbereitung. Beide Ester, die bereits im trocken aufbereiteten Rohkaffee zu finden waren sind in allen Stadien der Kaffeezubereitung aromapotent. Die Extraktionsausbeute bei der Herstellung des Kaffeegetränks beträgt für die beiden Ester etwa 47% [TEUTSCH, 2004]. Bei  $R_t$  17.80 und  $R_t$  17.91 kam es zur Detektion von **2-** und **3-Methylbuttersäure** (19 und 20), die eine schweißige Geruchsqualität aufweisen [CZERNY und GROSCH, 2000]. Beide Isomere weisen in der Analyse von *Teutsch* in trocken und nass aufbereiteten Röstbohnen– folglich auch im Kaffeegetränk – dieselben Verdünnungsfaktoren auf [TEUTSCH, 2004]. Bei einer Retentionszeit von 5.89 wurde **Essigsäure** (4) aufgezeichnet. Diese in geringer Konzentration enthaltene Aromakomponente im Kaffeegetränk wurde in der Analyse von *Teutsch* im trocken aufbereiteten Röstkaffee mit höheren FD-Faktoren nachgewiesen (siehe Tabelle 11; 2.10.5) [TEUTSCH, 2004].



**2-Pentanon** (8), ein fruchtig – nach Bananen riechendes Keton – wurde bei  $R_t$  7.76 aufgezeichnet [BELITZ et al., 2008]; es kommt natürlicherweise im Kaffee vor. Zwei Diketone, **2,3-Pentandion** (9) und **2,3-Butandion** (Diacetyl; 12) konnten im Chromatogramm bei Laufzeiten von 8.09 bzw. 12.30 Minuten nachgewiesen werden. Beide Ketone, mit angenehmem Butteraroma, kommen im *Arabica*-Getränk in höherer Konzentration als in minderwertigen *Robusta*-Kaffees vor [SEMMELOCH und GROSCH, 1996]. Die Ausbeute bei der Zubereitung eines Kaffeegetränks beträgt für Diacetyl etwa 80% und für 2,3-Pentandion 85% [MAYER et al., 2000; BELITZ et al., 2008]. Beide Ketone sind mit relativ hohen Verdünnungsfaktoren (siehe Tabelle 11; 2.10.5) in den Untersuchungen von *Teutsch* nachgewiesen worden [TEUTSCH, 2004].

Im Chromatogramm, wiederum mit hoher Intensität, stellt das **Pyridin** ( $R_t$  10.00; 10) dar – es wurde bereits im *Robusta* Rohkaffee und Getränk nachgewiesen. Ein weiterer Pyridinabkömmling, das **Acetylpyridin** (29), welcher bei  $R_t$  25.40 aufgezeichnet wurde, weist ein Weißbrotkrusten-Aroma auf und kommt in vielen Röstprodukten vor [BELITZ et al., 2008].

Beim Rösten von Kaffee entstehen zahlreiche Pyrazinverbindungen, die einen großen Beitrag zum Kaffeearoma liefern. Bei einer Laufzeit von 13.83 Minuten wurde das **Dimethylpyrazin** (15) detektiert, welches nicht eindeutig identifiziert werden konnte. Alle Isomere, 2,3-, 2,5- und 2,6-Dimethylpyrazin, weisen eine röstige und nussige Geruchsnote auf [BAUER et al., 1997]. Bei  $R_t$  18.66 wurde das **2-Methylpyrazin** (22) detektiert, welches ebenso ein röstig-nussartiges Aroma aufweist. **Acetylpyrazin** (28), wurde im Chromatogramm des *Santos* bei einer Laufzeit von 24.76 Minuten detektiert; es weist einen popcornartigen Geruch auf und ist wichtig im Kaffeearoma. Das **2-Ethenyl-3,5-dimethylpyrazin** (31), welches ein erdig-röstiges Aroma aufzeigt, wurde bei  $R_t$  27.48 nachgewiesen [STEGLICH et al., 2000; BELITZ et al., 2008].

Das Methoxypyrazin, **3-Isobutyl-2-methoxypyrazin** (35), konnte bei  $R_t$  32.51 detektiert werden. Es wurde bereits im Rohkaffee nachgewiesen und gilt mit seiner grün-erbsigen Aromanote als charakteristische Aromakomponente mit höchstem Aromawert im Rohkaffee [HOLSCHER und STEINHART, 1995]. Außerdem ist es äußerst hitzeresistent – verändert die Konzentration während

des Röstvorgangs kaum – jedoch kommt es durch die intensiven Röstaromen weniger zur Geltung [CZERNY und GROSCH, 2000]. 3-Isobutyl-2-methoxypyrazin wurde auch im *Robusta*-Getränk nachgewiesen, allerdings gilt es als Schlüsselaromastoff in *Arabica*-Sorten [SEMMELOCH und GROSCH, 1996]. Die Extraktionsausbeute bei der Zubereitung eines Kaffeegetränks beträgt lediglich 25% [MAYER et al., 2000; BELITZ et al., 2008].

Thiazolverbindungen liefern einen wesentlichen Gesamtbeitrag zum Röstkaffee Aroma. Bei einer Laufzeit von 28.59 wurde das **Acetylthiazol** (34) aufgezeichnet, welches an den Geruch von geröstetem Mais erinnert [BELITZ et al., 2008]. Das **2-Furfurylthiol** (37), welches in *Robusta*-Sorten höher konzentriert ist, wurde auch beim *Santos* nachgewiesen ( $R_t$  34.93). Es weist eine angenehme, an Röstkaffee erinnernde Aromaqualität auf [SEMMELOCH und GROSCH, 1996; BAUER et al., 1997].

Ein kleiner Peak am Ende des Chromatogramms, bei einer  $R_t$  von 42.84, stellt  **$\beta$ -Damascenon** (40) dar. Die Konzentrationen im *Robusta*- und *Arabica*-Getränk sind in etwa gleich und die Ausbeute bei der Herstellung des Kaffeegetränks beträgt nur 11% [MAYER et al., 2000].

#### 4.1.4. Qualitative Auswertung des *Arabica Sidamo* Kaffeegetränk

Dem Kaffeeenießer öffnet sich beim hochwertigen äthiopischen *Arabica Sidamo* eine beeindruckende Geschmacksvielfalt. Zu seinem ausgesprochen würzig-kräftigen Aroma gesellt sich eine schokoladeartig schwere Fülle mit leicht nussigen und fruchtigen Nuancen. Einen wesentlichen Beitrag dazu liefern die **Methylfurane** ( $R_t$  5.63; 2 und  $R_t$  5.84; 3), sowie einige Alkyl- und Methoxypyrazine. *Arabica Sidamo* wird unter anderem wegen seiner milden Säure und dem geringen Koffeingehalt von Feinschmeckern wertgeschätzt.

Die Aufbereitung des *Arabica Sidamo* erfolgt, anders als beim *Santos*, im nassen Schema. Die *Sidamo*-Rohbohnen werden nach der Ernte bzw. nach dem „Entpulpen“ in Fermentationsbehälter transportiert. Dort findet eine 12 bis 48 stündige Fermentation durch pektinolytische Enzyme bzw. auch unter Beteiligung von Mikroorganismen statt. Es gilt herauszufinden, ob sich dieser Fermentationsprozess, der bei den *Sidamo*-Rohbohnen stattgefunden hat, Einfluss auf die Aromakonstellation genommen hat.

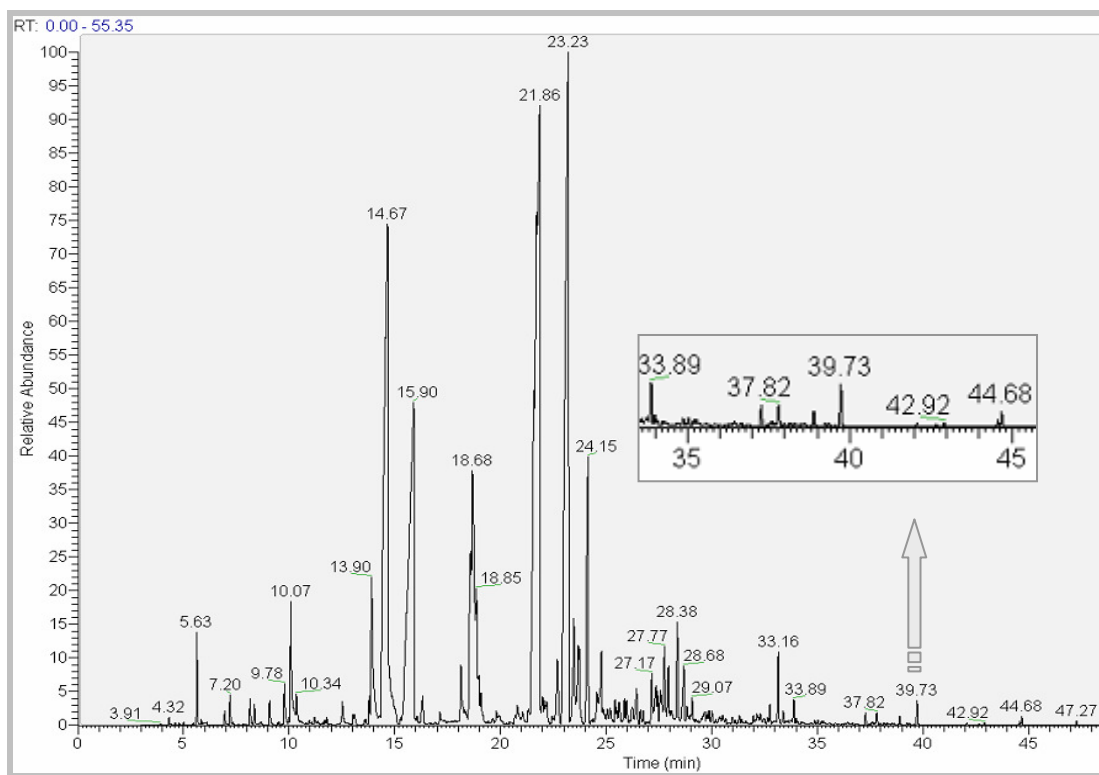


Abbildung 20 Chromatogramm: Kaffeegetränk Arabica Sidamo;  
24-Stunden-Messung mittels HS-SPME

Am ersten Blick, im Vergleich der Chromatogramme *Arabica Sidamo* (Abbildung 20) und *Santos*, merkt man eher nur geringe Unterschiede. Sie beschränken sich lediglich auf die Intensität der aufgezeichneten Peaks im Chromatogramm. Jedoch bei genauerer Betrachtung gibt es Differenzen zwischen den *Arabica*-Varietäten nasser und trockener Aufbereitung.

Den höchsten Peak im Chromatogramm stellt wiederum das fruchtig riechende **Furfurylacetat** ( $R_t$  23.23; 25) dar, gefolgt vom **5-Methylfurfural** (23) bei einer Laufzeit von 21.86 Minuten. Die Intensität des bittermandelartig riechenden 5-Methylfurfural ist im Chromatogramm des *Sidamo* deutlich höher, verglichen mit dem des *Santos*. Auch die Intensität des **Fufural**-Peaks (16) bei  $R_t$  14.67 ist merklich höher als im *Santos*-Chromatogramm. Die Intensität von **Pyridin** (10) bei 10.07 Minuten weist im Chromatogramm des *Sidamo* geringere Intensität auf als beim *Santos*.

In Tabelle 15 sind die wichtigsten Aromastoffe im Getränk des *Arabica Sidamo* zusammengefasst, die bei der HS-SPME-GC-MS gesammelt und aufgezeichnet wurden. Die Tabelle beinhaltet viele Aromasubstanzen, die beim

*Arabica Santos* Kaffeegetränk bereits detektiert wurden – folgedessen werden sie in diesem Abschnitt nicht mehr diskutiert.

**Tabelle 15** Geruchspotente Aromastoffe im Arabica Sidamo Kaffeegetränk  
24-Stunden Messung mittels HS-SPME-GC-MS

Nr.	R <sub>t</sub> (min)	Geruchsstoff*	Synonym	Geruchseindruck <sup>¥</sup>
1	4,32	Furan		
2	5,63	2-Methylfuran		schokoladeartig
3	5,84	3-Methylfuran		schokoladeartig
4	6,05	Essigsäure	Ethansäure	nach Essig
5	6,47	3-Methylbutanal	Isovaleral	malzig, apfelähnlich
6	7,20	2-Methylbutanal	2-Methylbutyraldehyd	malzig
7	7,83	2-Pentanon	Ethylacetone	fruchtig, nach Banane
8	8,15	2,3-Pentandion	Acetylpropionyl	butterartig
9	8,59	Propionsäure		ranzig
10	10,07	Pyridin	Azin, Azabenzol	unangenehm
11	12,15	Buttersäure	Butansäure	schweißig
12	12,52	Hexanal	Capronaldehyd	fettig-grün
13	13,03	Abhexon	3-Hydroxy-5-ethyl-4-methyl-2(5)-furanon	röstig, würzig, nach Karamell
14	13,41	Sotolon	3-Hydroxy-4,5-dimethyl-2(5H)-furanon	röstig, würzig, nach Karamell
15	13,90	Dimethylpyrazin		röstig
16	14,67	Furfural	Furancarboxyaldehyd	bittermandelartig
17	15,90	2-Furfurylalkohol	2-Furanmethanol	stechend
18	17,73	3-Methylbuttersäure	Isovaleriansäure	schweißig
19	18,58	Acetylfuran	2-Furylmethylketon	süß, balsamisch
20	18,75	2-Methylpyrazin		röstig, nussig
21	18,85	Ethylpyrazin		röstig, nussig
22	20,69	Furaneol	4-Hydroxy-2,5-dimethyl-3(2H)-furanon	fruchtig, nach Karamell
23	21,86	5-Methylfurfural	5-Methylcarboxaldehyd	bittermandelartig
24	22,59	2-Pentylfuran		
25	23,23	2-Furfurylacetat		fruchtig
26	23,68	2-Ethyl-3-methylpyrazin		röstig, nussig
27	24,15	2-Formylmethylpyrrol	1-Methylpyrrole-2-carboxaldehyd	
28	25,50	Acetylpyridin		nach Weißbrotkruste
29	26,76	2,3-Dimethyl-3-ethylfuran		
30	27,58	2,3-Dimethyl-5-ethylpyrazin		nussig, röstig, schokoladeartig
31	27,77	2-Acetylpyrrol		Weißbrotkruste, Reis, Popcorn
32	28,12	Cumarin	1,2-Benzopyron	würzig, nach Heu
33	28,38	o-Guajakol	2-Methoxyphenol	rauchig, phenolisch, süß
34	28,83	Acetylthiazol		nach Popcorn
35	29,75	Maltol	3-Hydroxy-2-methylpyron	süß-fruchtig, Karamell
36	31,61	Methoxypyrazin		nussig, röstig, süß
37	33,16	1-Furfurylpyrrol		
38	35,03	Furfurylmethyldisulfid		würzig, röstig, fettig
39	37,82	Ethylguajakol	2-Methoxy-4-ethylphenol	süß, phenolisch, brenzlich
40	39,18	Indol	Benzopyrrol	unangenehm, fäkalartig, blumig
41	39,59	Propylpyrazin		nussig, grünes Gemüse
42	39,73	Vinylguajakol	2-Methoxy-4-vinylphenol	rauchig, nach Nelke
43	42,66	β-Damascenon		gekochter Apfel, rosig

\* Übereinstimmung in NIST und WILEY: > 80 %, ¥ Literatur siehe Text

Beim *Arabica Sidamo* wurden annähernd 280 Aromastoffe aufgezeichnet, die sich abermals in die Verbindungsklassen nach *Nijssen et al.* (1996) einordnen lassen [NIJSSEN et al., 1996]. Ebenso wurde auch beim *Sidamo* eine Vielzahl an Furanon-Verbindungen nachgewiesen. Zum Beispiel tragen die röstigen und karamellartigen Aromaträger, **Abhexon** (13) und **Sotolon** (14), die bei  $R_t$  13.03 und  $R_t$  13.41 detektiert wurden, wesentlich zum würzigen Aroma des *Arabica Sidamo* bei. Eine weitere geruchsaktive Furanon-Verbindung, das **Furaneol** (22), welches bei 20.69 Minuten aufgezeichnet wurde, trägt zur leicht fruchtigen Aromanote des *Sidamos* bei.

Im Chromatogramm des *Arabica Sidamo* wurden auch zahlreiche aromapotente Pyrazin-Verbindungen detektiert, die das leicht nussige und angenehme Röstaroma des *Sidamo* unterstreichen. Das **Dimethylpyrazin** (15) mit seinen Isomeren und **2-Methylpyrazin** (20) die bei einer Retentionszeit von 13.90 und 18.75 Minuten aufgezeichnet wurden, spielen auch beim *Sidamo*-Kaffee eine wichtige Rolle für das charakteristische Gesamtaroma.

**Propionsäure** (9), eine aliphatische Säure, konnte im *Sidamo*-Chromatogramm bei einer Laufzeit von  $R_t$  8.59 detektiert werden. Sie kommt natürlicherweise im Kaffee vor und wird in der Literatur als stechend und ranzig riechend charakterisiert [ROTH und KORMANN, 1997]. Propionsäure konnte auch im *Robusta Madagaskar* Kaffeegetränk nachgewiesen werden. Die schweißig riechende **Buttersäure** (11), welche im Chromatogramm des *Sidamo* bei  $R_t$  12.15 aufgezeichnet wurde, konnte bereits in *Robusta Madagaskar* Rohbohne und Kaffeegetränk nachgewiesen werden. Der  $C_6$ -Aldehyd **Hexanal** (12), mit seiner fettig-grünen Geruchsqualität konnte bei  $R_t$  12.52 detektiert werden [MARTINETZ und HARTWIG, 1998]. Er wurde ebenso im Chromatogramm der *Robusta* Rohbohne und im zubereiteten *Robusta* aufgefunden.

Das **Ethylpyrazin** (21), welches bei 18.85 Minuten zur Detektion kam wurde bisher in keinem Chromatogramm nachgewiesen. Es weist eine röstig-nussige Geruchsqualität auf. Es konnten weitere Alkylpyrazine, die weder im *Robusta Madagaskar* noch im *Arabica Santos* aufgezeichnet wurden, detektiert werden. Das **2-Ethyl-3-methylpyrazin** (26), welches bei einer Retentionszeit

von 23.68 aufgezeichnet wurde, besitzt eine nussig-röstige Geruchsqualität. Bei  $R_t$  27.58 wurde das **2,3-Dimethyl-5-ethylpyrazin** (30) detektiert. Dieses Alkylpyrazin besitzt ein angenehm nussig-röstiges und an Schokolade erinnerndes Aroma. Weiters im Chromatogramm des *Sidamo*-Getränk kam es zur Aufzeichnung des **Methoxypyrazins** ( $R_t$  31.61; 36), welches ein nussig-röstiges und etwas süßliches Aroma aufweist. **Propylpyrazin** (41), mit nussigem Aroma und leichten „Grünnuancen“ wurde bei  $R_t$  39.59 aufgezeichnet [MASUDA und MIHARA, 1988; MIHARA und MASUDA, 1988]. Diese Pyrazin-Verbindungen tragen beachtlich zum angenehmen Aroma des hochqualitativen *Sidamo* bei.

**2-Pentylfuran** (24) bei  $R_t$  22.59 und **2,3-Dimethyl-3-ethylfuran** (29), bei  $R_t$  26.76 welche natürlicherweise im Kaffee Aroma vorkommen, konnten bislang noch nicht nachgewiesen werden [NIJSSEN et al., 1996].

Eine basische Verbindung, das **2-Acetylpyrrol** (31), welches bei  $R_t$  27.77 aufgezeichnet wurde, ist eine flüchtige Verbindung, die beim Röstvorgang gebildet wird. Es wurde nur im *Sidamo* nachgewiesen. In der Literatur wird es mit einem Brot- oder Popcorn-Aroma beschrieben [STEGLICH et al., 2000; BELITZ et al., 2008].

Eine weitere flüchtige Verbindung, die bislang noch nicht detektiert wurde ist **Cumarin** (32). Es handelt sich um ein Lacton und kam bei einer Retentionszeit von 28.12 zum Nachweis. Cumarin, als natürlicher Aromastoff im Kaffee besitzt einen angenehm würzigen Geruch, der an Heu erinnert [STEGLICH et al., 2000]. In anderen Literaturen wird Cumarin auch mit waldmeisterähnlichem Geruch beschrieben [ROTH und KORMANN, 1997; BAUER et al., 1997].

**Furfurylmethyldisulfid** (38), welches bei  $R_t$  35.03 nachgewiesen wurde, konnte weder im *Robusta* noch im *Santos* detektiert werden. Die Geruchsqualität dieser Schwefelverbindung wird als würzig, röstig und fettig angegeben [OHLOFF, 1990]. Weiters konnte **Indol** oder Benzopyrrol (40) bei 39.18 Minuten aufgezeichnet werden. Diese basische Verbindung hat in hoher Verdünnung eine exotische Blumennote [OHLOFF, 1990]. Bei  $R_t$  29.75 konnte, das vorher noch nie aufgefundene, **Maltol** (35) – eine Pyran-Verbindung –



nachgewiesen werden. Maltol entsteht infolge der *Maillard*-Reaktion aus Kohlenhydraten und besitzt einen süßen-fruchtigen und karamelligen Geruch, der an frisch gebackenen Kuchen erinnert. Außerdem verstärkt es den süßen Geschmack von Lebensmitteln und maskiert einen eventuell vorhandenen Bittergeschmack [BAUER et al., 1997; STEGLICH et al., 2000; BELITZ et al., 2008].

Die **Guajakole** ( $R_t$  28.38, 33;  $R_t$  37.82, 39;  $R_t$  39.73, 42) spielen auch beim *Arabica Sidamo* eine untergeordnete Rolle, denn sie erscheinen, genauso wie beim *Santos*, in deutlich geringerer Intensitäten, verglichen mit dem *Robusta*-Getränk.

Einige geruchsaktive Verbindungen, die im *Arabica Santos* nachgewiesen wurden, konnten im Chromatogramm des *Arabica Sidamo* nicht aufgefunden werden. In der Analyse von *Teutsch* (2004) konnte festgestellt werden, dass ein Unterschied zwischen gewaschenem und ungewaschenem Kaffee existiert. Dieser Unterschied, wird in allen Verarbeitungsstufen des Kaffees maßgeblich durch die fruchtig riechenden 2- und 3-Methylbuttersäureethylester verursacht. Diese Ester wurden im trocken aufbereiteten *Robusta* Rohkaffee ( $R_t$  16.52; 15) und im *Arabica Santos* ( $R_t$  16.40; 18) nachgewiesen [TEUTSCH, 2004]. Jedoch beim *Sidamo*, der als einziger Kaffee nass aufbereitet wurde, konnte man diese fruchtigen Ester nicht nachweisen. Sozusagen liefert das Fehlen von 2- und 3-Methylbuttersäureethylester Hinweis auf ein Kaffeegetränk, das aus trocken aufbereiteten Bohnen hergestellt wurde [TEUTSCH, 2004].

#### **4.1.5. Zusammenfassung der Ergebnisse *Robusta Madagaskar* Rohkaffee und Kaffeegetränk, *Arabica Santos* und *Arabica Sidamo***

Es wurden bei allen Chromatogrammen etwa 300 Substanzen detektiert. Manche Aromakomponenten liegen in so geringen Konzentrationen vor, dass sie nicht erfasst oder von den höher konzentrierten Aromastoffen „übertönt“ werden. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass sehr wohl deutliche Unterschiede zwischen *Arabica*- und *Robusta*-Varietäten, nicht nur im Geschmack sondern auch im Aroma, festzustellen sind – dies lässt sich anhand der Chromatogramme veranschaulichen. Auch beim *Robusta* Rohkaffee sind deutliche Differenzen, verglichen mit dem Kaffeegetränk, zu verzeichnen. Beim Rohkaffee wurden dennoch Substanzen detektiert, die auch im Kaffeegetränk nachgewiesen wurden, jedoch lagen die Schwerpunkte wo anders.

Bei den Rohbohnen wurde eine Vielzahl von Verbindungen detektiert, die erbsig-grüne bzw. erdige Geruchsqualitäten aufweisen. Unter anderem verursacht durch Alkylmethoxypyrazine, wobei in Studien mehrmals bestätigt wurde, dass 3-Isobutyl-2-methoxypyrazin und 3-Isopropyl-2-methoxypyrazin mit ihrem „grünen“ Geruch die prägendsten Aromakomponenten im Rohkaffee sind [HOLSCHER und STEINHART, 1995]. Ebenfalls einen Schwerpunkt im Aromaprofil des Rohkaffees nehmen fruchtige Aromastoffe ein. Hier ist die Substanzklasse der Aldehyde zu nennen. Das fruchtig riechende Propanal, welches während des Röstvorgangs abgebaut wird oder der Pelargonaldehyd, der im Kaffeegetränk keine Rolle spielt. Die Gruppe der Terpene ist im Rohkaffee vielfach enthalten. So konnten zum Beispiel die zitronenartig riechenden cyclischen Terpenverbindungen Limonen und  $\alpha$ -Terpinen nachgewiesen werden. Auch der Terpenalkohol Linalool spielt mit seiner blumig-frischen Aromanote, die an Maiglöckchen erinnert, eine wesentliche Rolle im Aromaprofil der Rohbohne. Weiters sind die beiden Terpenketone zu

nennen, die nur im Rohkaffee zum Nachweis kamen; das intensiv nach Menthol riechende Thujon und Kampfer. Auch zwei Ether – das kampferartig riechende Eucalyptol und das erdig-blumig riechende Linalooloxid – welche für das Aromaprofil der Rohbohne große Bedeutung haben, wurden nachgewiesen [ROTH und KORMANN, 1997; MARTINETZ und HARTWIG, 1998]. Guajakole, die in *Robusta*-Sorten Schlüsselaromastoffe darstellen, wurden zwar nachgewiesen, doch mit sehr geringer Intensität, da sie erst während des Röstvorgangs gebildet werden [CZERNY und GROSCH, 2000].

Beim Röstvorgang kommt es durch Um- und Abbaureaktionen sowie durch Bildung neuer Substanzen zur Veränderung der Aromakonstellation. Bedeutende Änderungen ergeben sich bei den Kohlenhydraten, hier kommt es durch die Erhitzung während des Röstvorgangs zur Bildung neuer aroma-, geschmacks- und farbgebender *Maillard*- und Karamellisierungsprodukten. Als Vorläufersubstanzen der Kaffeearomastoffe sind in erster Linie Saccharide und Aminosäuren sowie in geringem Umfang auch die Chlorogensäure anzusehen [FRANZKE, 1996; BELITZ et al., 2008].

Das Chromatogramm des *Robusta Madagaskar* Kaffeegetränks unterscheidet sich nicht nur eindeutig vom Chromatogramm der Rohbohnen, sondern auch beträchtlich von denen der *Arabica*-Kaffeegetränke. Das Gesamtroma des *Robusta*-Getränks wird sehr stark von den Guajakolen bestimmt, deren Intensität im Chromatogramm, verglichen mit den *Arabicas* enorm hoch ist. Diese Phenole, Guajakol, Vinyl- und Ethylguajakol, die ein unangenehmes rauchiges, phenolisches – an Leder erinnerndes Aromaprofil aufweisen – liefern das eindeutigste Indiz, sie sind in den *Robusta*-Sorten in wesentlich höheren Konzentrationen enthalten als in *Arabica*-Sorten. In keinem anderen Chromatogramm ist die Intensität der Peaks von Guajakol und seinen Abkömmlingen so hoch. Das Aromaprofil von *Robusta Madagaskar* wird vielfach von diesen phenolischen Verbindungen geprägt. Hierzu sind die würzigen, nach Nelken riechenden Phenole – Eugenol und Isoeugenol – zu nennen. Diese konnten nur im *Robusta*-Getränk nachgewiesen werden.

Ein weiteres Merkmal liefert 2-Methylisoborneol, welches nur im *Robusta* aufzufinden war. MIB, mit seiner muffigen und erdigen Geruchsqualität wird von einigen Autoren als weiterer Schlüsselaromastoff im *Robusta*-Getränk gehandelt, da die Konzentration auch hier sehr viel höher als in *Arabica*-Sorten ist [BLANK und GROSCH, 2002]. Des Weiteren sind im *Robusta*-Kaffeegetränk eine Vielzahl von Alkylpyrazinen detektiert worden. Diese sind unter anderem auch verantwortlich für das unangenehme erdige Aroma des *Robusta*-Getränks. Unter anderem spricht auch das muffig riechende Methanthiol, welches nur im *Robusta*-Getränk nachgewiesen wurde, für die minderwertige Qualität.

Das in höheren Konzentrationen vorkommende, nach Kaffee riechende 2-Furfurylthiol und Vanillin kommen im *Robusta* in höheren Konzentrationen vor. Der höhere Gehalt an Vanillin erklärt sich dadurch, dass es aus der in *Robusta*-Sorten in höherer Konzentration enthaltenen Ferulasäure gebildet wird [SEMMELOCH und GROSCH, 1995 und 1996; BEILITZ et al., 2008]. Diese Aromakomponenten, mit angenehmer Aromaqualität werden von den dominierenden Phenolen und Pyrazine „übertönt“.

Die Aromakonstellation der *Arabica*-Kaffeegetränke wird durch süß-karamellartige Aromastoffe bestimmt, die im *Robusta*-Getränk eher zur Minderheit gehören. Ausschlaggebend für dieses ausgesprochen angenehme röstige und nach Karamell riechende Aromaprofil ist eine Vielzahl von Furanon-Verbindungen, die beim *Santos* und *Sidamo* aufgefunden wurden. An diesem Punkt sollen, mit ihrem röstig-karamellartigen – auch fruchtiger Aromaqualität – die 2(5H)-Furanone Abhexon und Sotolon bzw. die 3(2H)-Furanone Furaneol und Ethylfuraneol, letzteres ist allerdings nur im *Santos* nachgewiesen worden, erwähnt werden. Diese für das Aroma des *Arabica*-Getränks wichtigen Aromastoffe konnten im *Robusta*-Kaffee nicht verzeichnet werden. Die Phenole, Guajakol und seine Abkömmlinge spielen im Getränk der *Arabica*-Varietäten eine untergeordnete Rolle, was auch im Chromatogramm durch die geringen Intensitäten gut erkennbar ist.

Wesentliche Unterschiede zwischen den beiden *Arabicas* erkennt man erst, wenn man die Chromatogramme näher betrachtet. In der Analyse von *Teutsch* wurde festgestellt, dass einige Aromastoffe im Kaffeegetränk von trocken aufbereiteten Bohnen höhere Verdünnungsfaktoren aufwiesen. Dazu zählten das malzig riechende Methylpropanal, Acetaldehyd mit fruchtig-stechendem Geruch und Essigsäure. Diese Verbindungen konnten, mit Ausnahme der Essigsäure, nur im *Arabica Santos* nachgewiesen werden. Ergänzend ist in den Untersuchungen von *Teutsch* festgestellt worden, dass bei der Herstellung eines Kaffeegetränks aus trocken aufbereitetem Röstkaffee 30 bis 40% höhere Gehalte an 2- und 3-Methylbutanal vorlagen. Dies konnte hier nicht festgestellt werden, da diese beiden *Strecker*-Aldehyde sowohl im *Santos* als auch im *Sidamo* detektiert wurden. Allerdings geben in allen Analysen von *Teutsch* die fruchtig riechenden 2- und 3-Methylbuttersäureethylester den fundamentalen Unterschied zwischen trockener und nasser Aufbereitung. Die Tatsache, dass diese beiden Ester im gewaschenen und fermentierten *Sidamo* nicht aufgefunden wurden, soll laut *Teutsch* den entscheidenden Hinweis liefern, dass es sich um einen nass aufbereiteten Kaffee handelt [TEUTSCH, 2004]. Außerdem wurden einige Alkylpyrazine mit röstig-nussigem Charakter qualifiziert, die im *Robusta* nicht zum Nachweis kamen. Wobei die Anzahl solcher nussig-röstiger und auch schokoladeartiger Pyrazine im *Sidamo* höher war.

Unterschiede der einzelnen Kaffeevarietäten sind in allen Formen der Zubereitung olfaktorisch wahrzunehmen. Die Analysen mittels HS-SPME-GC-MS geben Aufschluss über die jeweiligen Differenzen und ermöglichen somit auch eine Unterscheidung zwischen *Robusta*- und *Arabica*-Sorten. Abschließend lässt sich sagen, dass das Zusammenspiel aller bisher aufgefundenen 835 Aromakomponenten das herrliche Röstaroma ausmacht. Jede einzelne Substanz trägt einen Teil dazu bei – die eine mehr die andere weniger – da nicht jede Substanz aromaaktiv ist. Auch die Konzentrationen der Aromasubstanzen sind wichtig für das Gesamtroma. Zum Beispiel ist die Konzentration der im Aromaprofil penetranten Guajakole im *Robusta*-Kaffee um

einiges höher als bei hochwertigen *Arabica*-Sorten, was sich somit negativ auf das Gesamtaroma des Kaffeegetränks niederschlägt.

## 4.2. Untersuchungen der Innenraumluft Klassischer Wiener Kaffeehäuser mittels HS-SPME-GC-MS

Die Wiener Kaffeehaus-Tradition hat weltweit großen Ruhm erlangt und ist für Österreicher und Touristen aus aller Welt eine gern besuchte Institution. Im Rahmen dieser Arbeit galt anhand ausgewählter Klassischer Wiener Kaffeehäuser herauszufinden, wie es in solch einer Institution riecht. Zu dieser Analyse wurde die HS-SPME-Methode in Kopplung mit GC-MS gewählt, welche sich bereits anhand anderer Aromastoffanalysen als äußerst effizient erwies. Um die Ergebnisse der Raumluft-Untersuchungen klar darlegen zu können bedurfte es zusätzlicher Messungen. Hierzu waren die Kaffeeanalysen der *Robusta Madagaskar* Rohbohne und Getränk sowie die Getränke der *Arabica*-Varietäten *Santos* und *Sidamo* sehr hilfreich. Um die Ergebnisse der Kaffee-Untersuchungen vergleichend nützen und interpretieren zu können, war es notwendig, dieselbe Methode, die auch in den Kaffeehausanalysen verwendet wurde, anzuwenden. In diesen Kaffeeanalysen wurden bereits etliche der 835 bekannten Aromastoffe detektiert, die nach *Nijssen et al.* (1996) in Verbindungsklassen eingeteilt werden.

In allen Kaffeehäusern, deren Raumluft im Rahmen dieser Untersuchung gemessen und analysiert wurden, war der Zigarettenrauch im Innenraum der Cafés der dominanteste Geruch und olfaktorisch kaum zu „überriechen“.

Um die flüchtigen Bestandteile des Zigarettenrauchs im Kaffeehaus besser interpretieren und vor allem nachweisen zu können, bedurfte es einer zusätzlichen Messung. Aus diesem Grund wurde ein Zigarettenrauch-Ausschlusstest durchgeführt, der Hilfestellung und Aufschluss über die flüchtigen Verbindungen des Zigarettenqualms geben soll.

#### 4.2.1. Zigarettenrauch-Ausschlusstest

Im Zigarettenrauch-Ausschlusstest konnten nicht nur das allzu bekannte Nikotin, sondern auch etliche Additive, die dem Tabak zugesetzt wurden, nachgewiesen werden. Diese Zusatzstoffe haben nicht nur einen konservierenden Effekt, sondern zeigen auch, neben der Tabak-Stabilisierung und Feuchthaltung, Wirkung auf sensorische Eigenschaften, was somit den Reiz des Rauchens verstärkt [MERCKEL und PRAGST, 2007]. Da sich diese Zigaretten-Zusatzstoffe in ihren chemischen Eigenschaften deutlich voneinander unterscheiden können, ist die Entwicklung einer „Screening-Methode“ oft schwierig. In unserem Fall erwies es sich als sinnvoll, dieselbe altbewährte HS-SPME-GC-MS-Methode anzuwenden, mit der auch in den Kaffeehäusern gearbeitet wurde.

Dieser Ausschlusstest wurde demnach als notwendig erachtet, damit die Substanzen, die im Zigarettenrauch enthalten sind, den detektierten Substanzen der Wiener Kaffeehäuser zugeordnet und sozusagen „abgezogen“ werden können.

Hierzu wurde in einem geruchsneutralen Raum die SPME-Messfaser fachgerecht positioniert. Ein Proband, ebenfalls möglichst frei von Fremdgerüchen, hauchte die ausgefahrene SPME-Faser mit Zigarettenrauch (Nebenstrom) eine ganze Zigarette lang an. Gleich darauf wurde die Fused-Silica-Faser in den Faserhalter eingefahren und in das GC-MS eingebracht. Damit die Substanzen im Chromatogramm des Zigarettenrauchs annähernd die analoge Laufzeit wie in den Kaffeehäusern aufwiesen und zur Gegenüberstellung herangezogen werden konnten, wurde wiederum dieselbe Methode wie in den Kaffeehausanalysen angewandt. Jeder einzelne Peak im nachfolgenden Chromatogramm (Abbildung 21) wurde mit den Massenspektren der WILEY- und der NIST-Datenbank verglichen und ausgewertet.



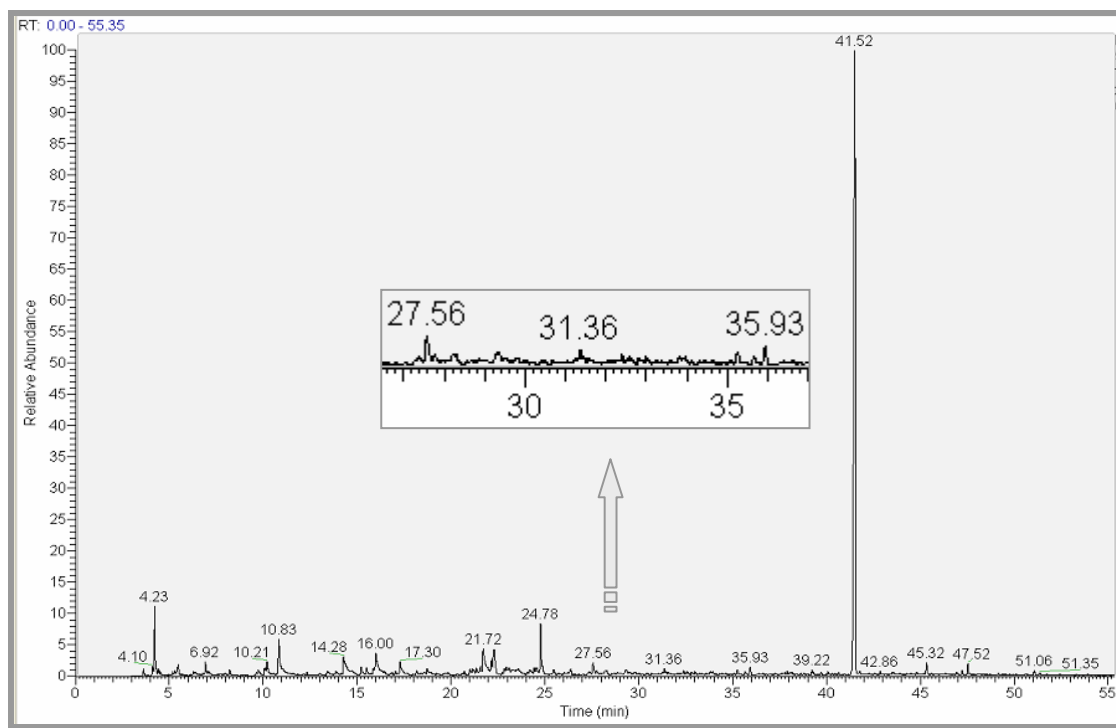


Abbildung 21 Chromatogramm: Ausschlusstest-Zigarettenrauch (Nebenstrom)  
mittels HS-SPME

Zum Teil finden sich diese flüchtigen Zigarettenrauch-Verbindungen (siehe Tabelle 16) mit unterschiedlichen Intensitäten in den Chromatogrammen der Kaffeehäuser wieder. Dieser Zigarettenrauch-Test gibt Aufschluss über die Herkunft einiger nachgewiesener Kaffeehaus-Substanzen und leistet Hilfestellung bei der Interpretation der achtstündigen Innenraumluft-Messungen. Folgedessen kann gezeigt bzw. bestätigt werden, welche Substanzen im Kaffeehaus vom Zigarettenrauch stammen.

Tabelle 16 Auszug der Substanzen im Zigarettenrauch; Messung mittels HC-SPME-GC-MS

Nr.	R <sub>t</sub> (min)	Substanz*	Nr.	R <sub>t</sub> (min)	Substanz*
1	4,10	Acrolein	25	19,75	Myrtenol
2	4,23	1,3-Pentadien	26	21,02	Ethyltoluol
3	4,45	Acrylnitril	27	21,17	Pseudocumen
4	5,18	3-Nitropentanol	28	21,34	Mesitylen
5	5,27	Cyclopentan	29	21,72-21,96	Benzaldehyd
6	5,47	2- und 3-Methylfuran	30	22,16	Phenol
7	6,81	2,6-Nonadienal	31	22,84	Benzonitril
8	6,92	Benzol	32	22,95	Cumol
9	7,58	1-Hepten	33	23,58-24,07	Pyran
10	8,21	2,5-Dimethylfuran	34	24,20	Nikotinaldehyd
11	9,28	4-Hydroxybenzoesäure	35	24,33	Nikotinnitril
12	9,98	Pyridin	36	24,53	Hemellitol
13	10,21	Pyrrol	37	24,78	(+)-Limonen
14	10,83-11,85	Toluol	38	27,56	Kresole
15	13,40	1,2-Cyclohexandimethanol	39	35,93	trans-Zimtaldehyd
16	13,50	α- und β-Picolin	40	39,22	Indol
17	13,95	3-Nitroaminopyridin	41	40,09	Methylnaphthalin
18	14,28	Furfural	42	40,45	Triacetin
19	15,22	2-Furfurylalkohol	43	40,65	Hexahydrofarnesol
20	15,51	Ethylbenzol	44	41,52	Nikotin
21	15,63-16,00	Xylol	45	45,18	Dimethylnaphthalin
22	17,30	Styrol	46	47,22	Pentadecan
23	18,02	Myrtenal	47	47,52	Nikotylin
24	18,18	2-Methyl-2-cyclopenten-1-on			

\* Übereinstimmung in NIST und WILEY: &gt;80 %

#### 4.2.2. Allgemeines zu den Kaffeehaus-Messungen

In allen Kaffeehäusern wurde mithilfe eines erstellten „Bewertungsbogens“ (siehe Anhang) der Gesamteindruck des Kaffeehauses erfasst. Bei jeder Messung wurde in diesem Bewertungsblatt die von uns wahrgenommenen Eindrücke und Auffälligkeiten notiert und später zur Interpretation der Chromatogramme herangezogen.

Jener Bewertungsbogen beinhaltet allgemeine Informationen, beispielsweise Datum und Uhrzeit. Diese Parameter sind interessant, da der Kaffeekonsum auf jeden Fall tages- und auch klimaabhängig ist. In kälteren Jahreszeiten ist ein Kaffeehausbesuch sicherlich häufiger als in warmen Sommermonaten. Folglich wurde auch das Wetter am Tag der Messung

aufgezeichnet. Außerdem wurden der SPME-Standort und die Messdauer protokolliert.

Wie bereits mehrfach erwähnt, setzt sich das wohlriechende Kaffeearoma aus 835 Aromakomponenten zusammen. Um möglichst viele dieser flüchtigen Kaffeearomastoffe einzufangen, wurde in den Kaffeehaus-Messungen das SPME-„Sampling“-Gerät in der Nähe der Kaffeezubereitung positioniert. Wichtig dabei ist, die SPME-Faser so aufzustellen, dass sie vor unbefugtem Zugriff geschützt ist, da diese Fused-Silica-Faser sehr empfindlich und mit großer Sorgfalt zu behandeln ist.

Das SPME-Messgerät wurde in jedem Kaffeehaus für jeweils drei, sechs und acht Stunden aufgestellt. Dabei wurde die Faser in ein hohes Wasserglas vertikal – mit der beschichteten Faser nach oben – an einem geschützten Platz positioniert. Die Chromatogramme der unterschiedlichen Messzeiten wurden infolgedessen ausgewertet und verglichen, dabei konnte festgestellt werden, dass bei den „Acht-Stunden“-Messungen die besten Ergebnisse erzielt wurden.

Weiters wurde auch die im Kaffeehaus verwendete Kaffeesorte und die Zubereitungsart vermerkt. Die Zubereitungsart ist relevant für die Kaffeearomaentfaltung, die hier sehr differenzieren kann. Bei Espresso-Maschinen, die in allen Kaffeehäusern aufzufinden waren, kommt es sicherlich zu einer stärkeren Aromaentfaltung. Daneben wurde auch die Gästefrequenz notiert. Diese trägt natürlich einen wesentlichen Teil zum Duft im Kaffeehaus bei, da – wenn sich viele Gäste in den Räumlichkeiten befinden – mehr konsumiert und eventuell mehr zum Zigarettenrauch beigetragen wird. Außerdem wurden auch prägnante Fremdgerüche protokolliert, da diese auch einen Teil zum Kaffeehausduft beitragen. Solche Fremdgerüche stammten vor allem von diversen Speisen, die im Kaffeehaus serviert werden, oder auch von Parfüms und anderen kosmetischen Mitteln. Ansonsten wurde im Bewertungsbogen von den Raucher-/Nichtraucherbereichen Notiz genommen. Dabei spielt der Standort der SPME-Faser wiederum eine tragende Rolle, da der Zigarettenrauch in den unterschiedlichen Gästebereichen ausgesprochen differenzieren kann.

Die Kaffeehaus-Chromatogramme können somit dem Zigarettenrauch-Test und den Kaffeeanalysen gegenübergestellt werden. Auf diese Weise kann man die flüchtigen Substanzen vom Zigarettenrauch und die Aromakomponenten des Kaffeegetränks den Kaffeehaus-Chromatogrammen zuordnen.

Nach den erfolgten Messungen wurde die SPME-Faser auf schnellstem Weg ins Labor gebracht und in das GC-MS eingespritzt. Bei den folgenden Chromatogrammen handelt es sich wiederum um Totalionenchromatogramme, die nur eine rein qualitative Aussage liefern. Die erhaltenen Chromatogramme wurden wiederum mit den Spektrenbibliotheken von WILEY und NIST ausgewertet. Weiters konnten die in den Kaffeehäusern aufgefunden Substanzen mit der vollständigen Liste der Kaffeearomastoffe nach *Nijssen et al.* (1996) verglichen und eruiert werden. Dazu lieferten die voran stehenden Untersuchungen der Kaffeegetränke große Hilfestellung. Zur weiteren Interpretation der Chromatogramme wurden aufliegende Studien und Literaturwerke herangezogen.

Alle „Acht-Stunden“-Messungen wurden in Form der Chromatogramme illustriert und in tabellarischer Form erörtert. Zudem wurden aufgefundene Kaffeearomastoffe bzw. Tabakrauch-Inhaltsstoffe in der Tabelle erkenntlich dargestellt.

### 4.2.3. Qualitative Auswertung der Innenraumluft des *KLEINEN CAFÉS*

#### 4.2.3.1. Allgemeines

Die „Acht-Stunden“-Messung im *Kleinen Café* fand am 16. Jänner 2008 von 10.00 Uhr vormittags bis 18.00 Uhr abends statt. Das Wetter am Messtag war kalt und trocken. Die SPME-Faser wurde im ersten Raum, an der Getränkebar auf einem höheren Podest errichtet. Dabei wurde das SPME-„Sampling“-Gerät vertikal in ein hohes Wasserglas gegeben und in die Nähe der Espressomaschine gestellt. Die „ausgefahrene“ Messfaser stand somit im Gästebereich – Nähe der Kaffeezubereitung. Auch ein Geschirrspüler befand sich in der Nähe des SPME-Standorts.

Im *Kleinen Café* gab es zum Zeitpunkt der Messung keine klare Trennung zwischen Raucher- und Nichtraucherbereichen. Der Zigarettengeruch war zu jeder Tageszeit deutlich wahrzunehmen und stieg mit zunehmender Gästezahl. Am Vormittag war die Besucherzahl eher spärlich. Ab Mittag bis frühen Nachmittag war das *Kleine Café* an jenem Tag sehr gut besucht. An der Theke wurden vormittags frische Kräuter, wie Dill und Petersilie sowie Gemüse – unter anderem Paprika, Gurken und Tomaten – für die für dieses Kaffeehaus typischen belegten Brote geschnitten. Der Geruch nach frischen Kräutern und Gemüse war olfaktorisch in den ersten Messstunden ausgesprochen gut wahrnehmbar und wurde als Fremdgeruch im Bewertungsbogen notiert. Als Mittagsmenü wurden am Messtag „Krautfleckerl“ mit grünem Salat angeboten, welche während der Mittagszeit in Behältnissen – Nähe des SPME-Standorts – warm gehalten wurden. Abends war die Gästefrequenz gleichermaßen hoch wie am Nachmittag. Das wohlriechende Kaffeearoma war am Messtag kaum aufspürbar; am ehesten noch an der Theke bei der Espressomaschine. Der Zigarettenrauch war gegen 18.00 Uhr deutlich wahrzunehmen. Da das *Kleine*

*Café* durch zwei Eingänge betretbar ist, sorgte immer ein angenehmes „Lüftchen“ für frische Zugluft.

Am Ende der Messdauer wurde die Faser vorsichtig vom Standort genommen, in die Fasernadel eingefahren und ins Riechstoff-Labor gebracht. Dort wurde die von uns entwickelte Methode eingestellt und sofort in den Gaschromatographen eingespritzt. Anschließend wurden mithilfe der Spektrenbibliotheken von WILEY und NIST die Auswertung der Chromatogramme bewerkstelligt.

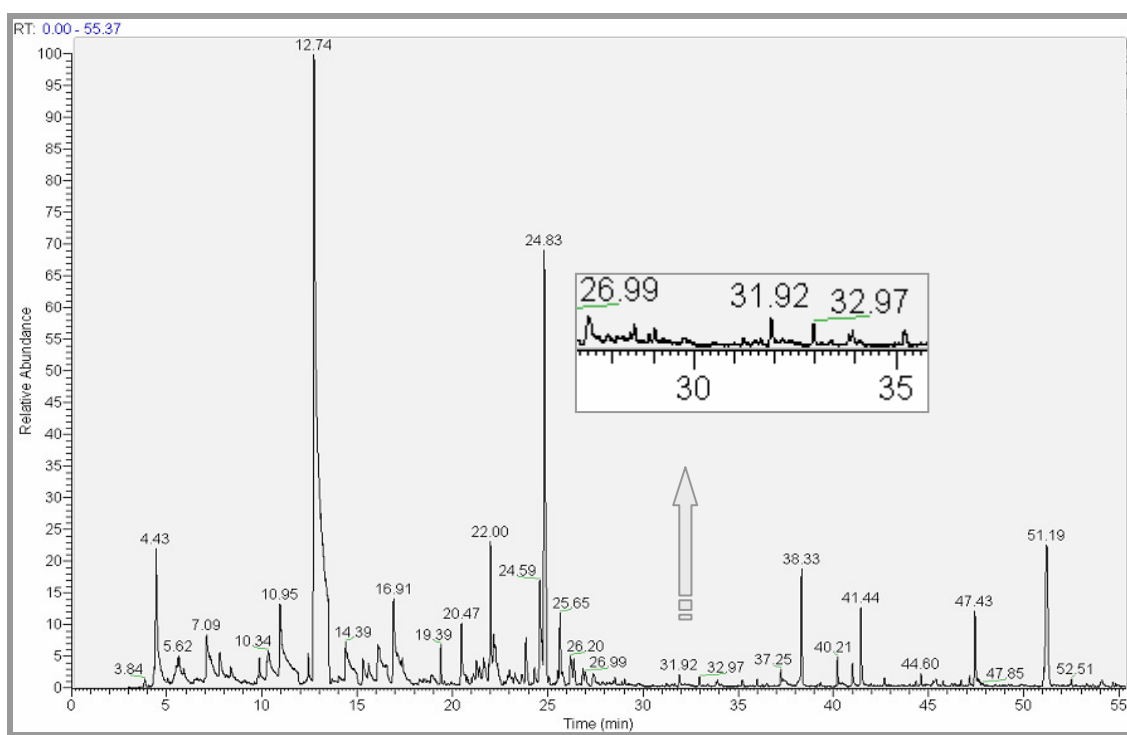


Abbildung 22 Chromatogramm: Kleines Café; 8-Stunden-Messung  
mittels SPME-Faser

#### 4.2.3.2. Auswertung des „Acht-Stunden“-Chromatogramms

In der „Acht-Stunden“-Messung konnten etwa 250 flüchtige Verbindungen per GC-MS nachgewiesen werden. Die nachfolgende Tabelle (Tabelle 17) gibt einen Überblick der relevantesten Verbindungen, die im *Kleinen Café* mit der

SPME-Faser erfasst und in Verbundenheit mit dem GC-MS aufgezeichnet wurden.

Vergleicht man das Chromatogramm der „Acht-Stunden“-Messung (siehe Abbildung 22) mit dem der reinen Zigarettenrauch-Messung, so konnten einige Substanzen aufgefunden und zur Interpretation herangezogen werden. Folglich kann man darauf schließen, dass diese Substanzen unter anderem vom Zigarettenrauch stammen. Diese bereits im Zigarettenrauch detektierten Substanzen wurden in der Tabelle mit ein „x“ markiert. Zum Teil sind einige dieser Verbindungen natürlicherweise im Röstkaffee enthalten und konnten mit der Liste nach *Nijssen et al.* (1996) identifiziert werden. Diese im Kaffee vorkommenden Aromakomponenten wurden in der Tabelle „fett“ gekennzeichnet. Es ist aber auch möglich, dass manche Substanzen von einer anderen Quelle stammen, von diversen Speisen, die im Kaffeehaus angeboten werden. Zudem können sie von kosmetischen Mitteln und Parfüms kommen, welche aus vielen Aromakomponenten bestehen und von den Kaffeehaus-Besuchern ins Lokal „eingetragen“ wurden.

*Tabelle 17 Substanzen der achtstündigen Raumluftmessung des Kleinen Café mittels HS-SPME-GC-MS*

Nr.	R <sub>t</sub> (min)	Substanz*	Synonym	Zig.
1	4,43	<b>1,3-Pentadien</b>	Piperylen	x
2	5,38	<b>Harnstoff</b>	Carbamid; Urea	
3	5,62	<b>2- und 3-Methylfuran</b>		x
4	5,94	<b>Essigester</b>	Ethylacetat	
5	7,09	<b>Benzol</b>		x
6	8,32	Trichlorethen	Trichlorethylen	
7	8,41	<b>2,5-Dimethylfuran</b>		x
8	9,12	4-Hydroxybenzoesäure	PHB	x
9	10,34	<b>Pyrrol</b>	Pyrrolin	x
10	10,95	<b>Pyridin</b>	Azin, Azabenzol	x
11	11,00-11,73	<b>Toluol</b>	Methylbenzol	x
12	12,74	Tetrachlorethen	PER	
13	13,99	<b>Methylpyridin</b>	α- und β-Picolin	x
14	14,39	<b>Furfural</b>	Furancarboxyaldehyd	x
15	15,36	<b>2-Furfurylalkohol</b>	2-Furanmethanol	x
16	15,65	<b>Ethylbenzol</b>	Phenylethan	x
17	15,75-16,21	<b>Xylol</b>	Dimethylbenzol, o-, m- p-Xylol	x
18	16,91	Senföl	Allylisothiocyanat	
19	17,43	<b>Styrol</b>	Vinylbenzol, Ethenylbenzol	x
20	18,12	Myrtenal	Pin-2-ene-1-carbaldehyd	x
21	18,57	<b>Acetylfuran</b>	2-Furylmethylketon	
22	21,21	<b>1,2,4-Trimethylbenzol</b>	Pseudocumen	x
23	21,39	<b>1,3,5-Trimethylbenzol</b>	Mesitylen	x
24	21,50	<b>5-Methylfurfural</b>	5-Methylcarboxaldehyd	
25	21,71	<b>Benzaldehyd</b>	Benzcarbaldehyd	x
26	22,00	<b>Phenol</b>		x
27	22,83	<b>Decan</b>		
28	22,91	<b>Furfurylacetat</b>		
29	23,08	Cumol	Isopropenylbenzol	x
30	23,61	(+)-α-Santalol	Sandal	
31	24,37	Nikotinaldehyd	Acetyloxim	x
32	24,59	1,2,3-Trimethylbenzol	Hemellitol	x
33	24,83	<b>(+)-Limonen</b>	1,8-p-Menthadien	x
34	26,20-26,99	<b>Methylphenol</b>	Kresol	x
35	27,63	p-Cymol	p-Isopropyltoluol	
36	28,58	<b>(+/-)-Linalool</b>	3,7-Dimethyl-1,6-octadien-3-ol	
37	28,95	Nonanal	Pelargonaldehyd	
38	30,03	<b>Maltol</b>	3-Hydroxy-2-methyl-4-pyron	
39	31,92	Menthon	2-Isopropyl-5-methylcyclohexanon	
40	32,26	Eucarvon	2,6,6-Trimethyl-2,3-cycloheptadien-1-on	
41	32,97	(-)-Menthol	2-Isopropyl-5-methylcyclohexanol	
42	33,90	<b>Naphthalin</b>		
43	33,98	<b>α-Terpineol</b>		
44	36,04	trans-Zimtaldehyd	3-Phenyl-2-propenal	x
45	36,57	(+)-Carvon	Carvol, Karvon	
46	38,33	tert-Hexadecanthiol		



Fortsetzung Tabelle 17				
Nr.	R <sub>t</sub> (min)	Substanz*	Synonym	Zig.
47	39,25	<b>Indol</b>	Benzopyrrol	x
48	39,39-40,17	<b>Methylnaphthalin</b>	versch. Isomere	x
49	40,52	Triacetin	1,2,3-Propantrioltriacetat	
50	41,05	Ionon		
51	41,06	$\alpha$ -Terpinylacetat		
52	41,44	(S)-Nikotin	1-Methyl-2-(3-pyridinyl)-pyrrolidin	x
53	42,94	<b>Tetradecan</b>		
54	44,60	<b>Dimethylnaphthalin</b>	versch. Isomere	x
55	45,44	Myosmin	3-(3,4-Dihydroxy-2H-pyrrol-5-yl)Pyridin	
56	47,43	<b>Pentadecan</b>		x
57	47,85	Nikotyrin	1-Methyl-2-(3-pyridyl)pyrrol	x
58	51,19	<b>Hexadecan</b>		
59	51,70	Phthalsäurediethylester	Diethylester, Diethylphthalat	
60	54,08	$\beta$ -Methylionon		
* Übereinstimmung in NIST und WILEY: > 80 %				

Den höchsten Peak im Chromatogramm der „Acht-Stunden“-Messung – bei R<sub>t</sub> 12.74 – stellt das **Tetrachlorethen** (12) (alt: Perchlorethylen; PER) dar. Diese Substanz fällt in die Gruppe der leichtflüchtigen Chlorkohlenwasserstoffe (LCKW) und findet als Reinigungsmittel bzw. Lösungsmittel für lipophile Substanzen (Fette, Wachse) Verwendung [HULPKE et al., 1996]. Da die SPME-Messfaser in der Nähe des Geschirrspülers positioniert war, ist es möglich, dass diese Substanz vom Spülmittel stammt. **(+)-Limonen** (33), welches bei einer R<sub>t</sub> 24.83 den zweithöchsten Peak im Chromatogramm darstellt, wurde bereits im Rohkaffee nachgewiesen. Es weist einen orangenähnlichen Geruch auf und kommt in der Natur sehr häufig vor. Vor allem in Pomeranzen-, Kümmel- und Dillöl, sowie in Orangen [ROTH und KORMANN, 1997; MARTINETZ und HARTWIG, 1998]. Da am Tag der Messung Dillkraut auf der Anrichte lag, kann (+)-Limonen durchaus vom Dill stammen. Weitere relevante Quellen sind Rosmarin und schwarzer Pfeffer sowie koffeinhaltige Tees und Wein, in welchen Limonen als Aromastoff anzufinden ist [NIJSSEN et al., 1996]. Außerdem konnte Limonen auch im Chromatogramm des Zigarettenrauchs nachgewiesen werden. Limonen wird in der Tabakindustrie als Zusatzstoff eingesetzt, um den penetranten Geruch des Zigarettenrauch-Nebenstroms zu mindern [NIJSSEN et al., 1996; MERCKEL und PRAGST, 2005].

Bei  $R_t$  4.43 konnte das **1,3-Pentadien** (1), auch Piperylen, nachgewiesen werden. Es gilt als natürlicher Aromastoff in Röstkaffee und konnte ebenfalls im Zigarettenrauch nachgewiesen werden. **Harnstoff** (2) – anders Urea oder Carbamid – konnte bei  $R_t$  5.38 als relativ schwacher Peak aufgezeichnet werden. Urea kommt natürlicherweise im Kaffee vor – auch in Rohtabak und jungen Tabakpflanzen konnte Carbamid nachgewiesen werden. Harnstoff erhöht den pH-Wert des Zigarettenrauchs, dadurch steigt der Nikotin-Anteil des Zigarettenqualms. Der Raucher nimmt dadurch mehr Nikotin auf, was in weiterer Folge Einfluss auf das Suchtverhalten nimmt [NIJSSEN et al., 1996; MERCKEL und PRAGST, 2005]. Bei  $R_t$  5.62 kam es zum Nachweis von **2- und 3-Methylfuran** (3), deren Isomere nicht eindeutig identifiziert werden konnten. Sie wurden bereits im Kaffeegetränk *Sidamo*, *Santos* und *Madagaskar*, sowie im Zigarettenrauch nachgewiesen. **Essigester** (4; Ethylacetat), der bei  $R_t$  5.94 zur Detektion kam, ist ein natürlicher Kaffeearomastoff. Dieser Ester ist als Reinsubstanz eine fruchtig riechende Flüssigkeit mit einer Weinbrand-Note und gilt als Hauptester in Früchten. Ethylacetat wird häufig zur Aromatisierung von Weinbränden und Limonaden verwendet und kommt von Natur aus in geringen Mengen in Wein, Bier und Schwarztee vor. Ethylacetat zählt überdies zu den Aromastoffen in Tomaten, welche für die belegten Brote an der Theke frisch geschnitten wurden. Zudem wurde dieser Ester auch als Komponente von Körperausdünstungen in Innenräumen identifiziert [NIJSSEN et al., 1996; PLUSCHKE, 1996; BAUER et al., 1997]. **Benzol** ( $R_t$  7.09; 5); **Toluol** ( $R_t$  11.00-11.73; 11) und **Xylol** ( $R_t$  15.75-16.21; 17) – kurz BTX – zählen zu den aromatischen Kohlenwasserstoffen. Die BTX-Aromaten wurden im Zigarettenrauch nachgewiesen und sind außerdem natürlich vorkommende Aromastoffe in Röstkaffee [NIJSSEN et al., 1996]. Sie werden unter anderem auch industriell hergestellt und in Benzin zur Erhöhung der Octanzahl zugesetzt. BTX-Aromaten weisen einen charakteristischen Geruch auf und können in der Atmosphäre bei der Smogbildung mitwirken. Außerdem werden diese aromatischen Kohlenwasserstoffe als Lösungsmittel für Fette und Öle verwendet. Benzol als Lösungsmittel wurde – wegen seiner krebserregenden Wirkung – vorwiegend durch Xylol und Toluol ersetzt. Benzol stammt wohl eher

vom Zigarettenrauch, diese Vermutung gilt auch für Toluol und Xylol [HULPKE et al., 1996]. Toluol konnte aber auch im *Robusta Madagaskar* Rohkaffee und Kaffeegetränk nachgewiesen werden. Xylol, welches als o-, m-, und p-Isomer existiert, konnte im Rahmen dieser Arbeit nicht eindeutig identifiziert werden. **Trichlorethen** (6), welches bei einer Laufzeit von 8.32 Minuten aufgezeichnet wurde, zählt ebenfalls – wie Tetrachlorethen – zu den leichtflüchtigen Chlorkohlenwasserstoffe (LCKW). Es weist gute fettlösende Eigenschaften auf und wird als Reinigungs- und Entfettungsmittel eingesetzt [HULPKE et al., 1996]. Da es leicht flüchtig ist, kann es vom Spülmittel, welches im Geschirrspüler verwendet wurde, stammen. **2,5-Dimethylfuran** ( $R_t$  8.41; 7) gilt als Aromastoff in Röstkaffee und konnte ebenso im Zigarettenrauch nachgewiesen werden [NIJSSEN et al., 1996]. Die zur Gruppe der Phenolsäuren zählende **4-Hydroxybenzoesäure** (PHB; 8) konnte bei 9.12 Minuten nachgewiesen werden. PHB kommt vor allem in Beerenobst und Gewürzen vor und wurde auch im Zigarettenrauch-Test nachgewiesen [BELITZ et al., 2008].

Die beiden basischen Verbindungen **Pyrrol** (9) und **Pyridin** (10) konnten bei  $R_t$  10.34 bzw.  $R_t$  10.95 nachgewiesen werden. Beide Verbindungen kommen natürlicherweise im Kaffee vor, wobei Pyridin in allen durchgeführten Kaffee-Messungen aufgefunden wurde [NIJSSEN et al., 1996]. Außerdem erwiesen sich Pyrrol und Pyridin als Zigarettenrauch-Inhaltsstoffe, indes Pyridin natürlicherweise in der Tabakpflanze vorkommt. Da Pyridin synergistische Wirkung mit Nikotin besitzt, wird es als Additiv dem Tabak beigesetzt [MERCKEL et al., 2006].  $\alpha$ - oder  $\beta$ -**Picolin** (13; Methylpyridin) – deren isomere Form im Rahmen dieser Untersuchung nicht eindeutig identifiziert werden konnte – wurde bei  $R_t$  13.99 aufgezeichnet.  $\alpha$ - sowie  $\beta$ -Picolin gelten als Kaffeearomastoffe, zudem konnten sie auch in der Zigarettenrauch-Messung nachgewiesen werden. Eine in dieser Arbeit bereits mehrfach erwähnte Verbindung, das **Furfural** (14), welches in den Kaffee-Messungen immer ein Peak mit sehr hoher Intensität darstellte, konnte bei  $R_t$  14.39 nachgewiesen werden; allerdings mit wesentlich geringerer Intensität. Überdies kam es auch in der Zigarettenrauch-Messung zum Nachweis, ebenso mit sehr geringer

Intensität. **2-Furfurylalkohol** (15), welcher bei  $R_t$  15.36 zum Nachweis kam, wurde in allen Kaffee-Messungen mit sehr hoher Intensität nachgewiesen; dies ist im Chromatogramm der „Acht-Stunden“-Messung nicht mehr der Fall. Er kommt in geringen Mengen im Nelkenöl vor und könnte somit von einer Gewürzteemischung stammen [ROTH und KORMANN, 1997]. Zudem zählen die beiden voranstehenden Furanverbindungen zu den Hauptbestandteilen des Nelkenblütenöls, welches in vielen Rauchwaren als Aromaträger eingesetzt wird. Eine weitere Furanverbindung, **5-Methylfurfural** (24), konnte bei  $R_t$  21.50 nachgewiesen werden. In den Kaffee-Messungen konnte dieser Aldehyd mit hoher Intensität aufgezeichnet werden; der Peak im Chromatogramm des *Kleinen Cafés* ist dagegen verschwindend klein. Diese drei voranstehenden Furanverbindungen kommen in vielen Lebensmitteln in bedeutsamen Konzentrationen vor. Erwähnenswert ist hier Milch, welche an der Theke für den Capuccino aufgeschäumt wurde oder in Orangen- und Apfelsaft sowie in Weißbrot, das an der Bar immer frisch aufgeschnitten wurde. Des Weiteren kommen sie in nennenswerten Konzentrationen in Grün- und Schwarztee vor [NIJSSEN et al., 1996]. **Ethylbenzol** (16), ein aromatischer Kohlenwasserstoff, konnte bei  $R_t$  15.65 detektiert werden. In der Liste nach *Nijssen et al.* (1996) gilt Ethylbenzol als natürlicher Kaffeearomastoff [NIJSSEN et al., 1996], konnte aber auch im Zigarettenrauch-Test aufgefunden werden. **Senföl** (18) oder Allylisothiocyanat – eine Schwefelverbindung – konnte bei einer Analysezeit von 16.91 Minuten aufgezeichnet werden. Diese Verbindung kommt hauptsächlich in *Brassicaceae* (Kreuzblütengewächse) vor. Zu dieser Pflanzenfamilie zählen beispielsweise Weißkraut, Kohlrabi, Radieschen, Senf, Kresse und Rettich. Senföl weist einen scharfen penetranten, kohlachtigen Geruch und Geschmack auf [MARTINETZ und HARTWIG, 1998; STEGLICH et al., 2000]. Es wurde nur im *Kleinen Café* nachgewiesen und könnte seinen Ursprung vom Gemüse haben, das für die Gemüsegar nitur der Brote an der Theke angerichtet wurde. Ergänzend könnte diese Verbindung auch von den „Krautfleckerl“ stammen, welche am Tag der Messung als Mittagsmenü angeboten wurden. Da im *Kleinen Café* gerne Würsteln mit Senf, im Wiener Dialekt eine „Hasse“, bestellt werden ist es auch möglich, dass

Allylthiocyanat – als natürlicher Bestandteil von Speisesenf – von dieser Quelle stammt. Bei 17.43 Minuten erscheint die benzolartig riechende Substanz **Styrol** (19), welche nach *Nijssen et al.* (1996) als Kaffeearomastoff gilt und zudem Ausgangsstoff für Polystyrol in Verpackungen ist [HULPKE et al., 1996; NIJSSEN et al., 1996]. Styrol ist Bestandteil des Zigarettenrauchs, der Nachweis konnte auch mit dem Zigarettenrauch-Test erbracht werden. Styrol gilt als potentiell Karzinogen und kann durch Decarboxylierung aus Zimtaldehyd, welches zu späterer Laufzeit im Chromatogramm aufgefunden wurde, entstehen [MERCKEL und PRAGST, 2005]. **Myrtenal** (20), ein cyclischer Terpenaldehyd, konnte bei 18.12 Minuten aufgezeichnet werden und ist bereits vom Zigarettenrauch-Test her bekannt. **Acetylfuran** (21) – ein Kaffeeröstaromastoff – konnte bei einer Laufzeit von 18.57 Minuten aufgezeichnet werden. Des Weiteren ist es bereits im Kaffeegetränk des *Robusta Madagaskar* und in den *Arabica*-Sorten *Santos* und *Sidamo* nachgewiesen worden [NIJSSEN et al., 1996].

Bei  $R_t$  21.21 wurde **Pseudocumen** (22; 1,2,4-Trimethylbenzol), bei  $R_t$  21.39 **Mesitylen** (23; 1,3,5-Trimethylbenzol) und bei  $R_t$  24.59 **Hemellitol** (32; 1,2,3-Trimethylbenzol) aufgezeichnet. Alle drei zu den aromatischen Kohlenwasserstoffen zählenden Verbindungen konnten im Zigarettenrauch-Ausschlusstest nachgewiesen werden. Zudem gelten Pseudocumen und Mesitylen als Aromakomponenten des Kaffees [NIJSSEN et al., 1996]. Hemellitol weist von den drei im achtstündigen Chromatogramm die höchste Intensität auf. Bei  $R_t$  21.71 und bei  $R_t$  22.00 konnten zwei aromatische Verbindungen, **Benzaldehyd** (25) und **Phenol** (26) detektiert werden. Beide Verbindungen sind natürliche Aromastoffe im Kaffee, während Benzaldehyd bereits im *Robusta Madagaskar* Rohkaffee und Kaffeegetränk nachgewiesen werden konnte. Außerdem wurden beide Substanzen im reinen Zigarettenrauch detektiert, wobei der bittermandelartig riechende Benzaldehyd dem Tabak als aromatischer Zusatzstoff beigelegt wird [NIJSSEN et al., 1996; MERCKEL und PRAGST, 2005]. Benzaldehyd wird vielfach in Aroma- und Parfüm-Kompositionen verwendet. Es ist durchaus vorstellbar, dass eine Kaffeehaus-Besucherin ein Parfüm mit Bittermandel-Note trug und während der Messzeit

an der Messfaser vorbeigegangen ist. Zudem ist dieser aromatischer Aldehyd Bestandteil des Bittermandelöls. Außerdem kommt Benzaldehyd natürlicherweise in geringen Mengen in Kernen von Mandeln, Kirschen, Marillen sowie Pfirsichen und Zwetschken vor [MARTINETZ und HARTWIG, 1998; BELITZ et al., 2008]. In der Lebensmittelindustrie wird dieser Aldehyd in der Marzipan- und Schokoladen- bzw. Likörindustrie verwendet und kann somit auch von diversen Mehlspeisen stammen [ROTH und KORMANN, 1997]. Phenol, als Pyrolyseprodukt, entsteht vor allem aus Benzylbenzoat und Methylsalicylat, welche als Aroma- und Geschmacksträger Tabakerzeugnissen zugesetzt werden [MERCKEL und PRAGST, 2005]. **Decan** (27), ein unverzweigtes C<sub>10</sub>-Alkan, welches bei R<sub>t</sub> 22.83 detektiert wurde, gilt in geringer Konzentration als natürliche Aromakomponente in Kaffee und Kakao [NIJSSEN et al., 1996]. Bei R<sub>t</sub> 22.91 wurde **Furfurylacetat** (28) aufgezeichnet, es stellt in den Chromatogrammen der *Arabica*-Sorten den höchsten Peak dar und weist in diesem Chromatogramm einen kaum wahrnehmbaren Peak auf. **Cumol** (29), anders Isopropenylbenzol, konnte bei einer Laufzeit von 23.08 Minuten aufgezeichnet werden. Dieser aromatische Kohlenwasserstoff konnte bereits in der Zigarettenrauch-Untersuchung nachgewiesen werden – und ist somit auf den Zigarettenrauch zurückzuführen. **α-Santalol** (30), welches bei R<sub>t</sub> 23.61 detektiert wurde, weist als Reinsubstanz einen Geruch nach Sandelholz auf. Es findet in Parfümkompositionen und Seifen Verwendung und ist in vielen Gewürzen – Rosmarin und Pfeffer – als Aromakomponente nachgewiesen worden [NIJSSEN et al., 1996; ROTH und KORMANN, 1997]. Bei R<sub>t</sub> 24.37 konnte **Nikotinaldehyd** (31; Acetyloxim) nachgewiesen werden; es stammt vom Zigarettenqualem. **o**-, **m**- und **p-Kresol** (34) konnten zwischen 26.20 und 26.99 Minuten detektiert werden, die genaue Identifizierung der Isomeren war jedoch nicht möglich. Kresol, mit seinem rauchigen Aromaprofil konnte bereits im minderwertigen *Robusta Madagaskar* Kaffeegetränk nachgewiesen werden; außerdem zeigten sich die aromatischen Isomere auch im Zigarettenrauch-Chromatogramm. **p-Kresol** wird in Parfüm- und Seifenkompositionen häufig verwendet [MARTINETZ und HARTWIG, 1998; BELITZ et al., 2008]. Der kleine Peak bei R<sub>t</sub> 27.63 zeigt **p-Cymol** (35), es kommt in vielen Pflanzen vor,

besonders in Dillkraut und Thymian. Demzufolge dürfte es auch von den Kräutern stammen, die während der Messzeit an der Theke für die Brote geschnitten wurden. Zudem konnte p-Cymol von den Autoren *Nijssen et al.* (1996) als Aromastoff in Grün- und Schwarztee charakterisiert werden. Außerdem ist es Bestandteil des Myrtenöls, welches Einsatz in der Parfümerie findet [NIJSSEN et al., 1996; ROTH und KORMANN, 1997; BELITZ et al., 2008]. **(+/-)-Linalool** (36), das bei  $R_t$  28.58 zur Detektion kam, wurde bereits im Rohkaffee nachgewiesen und mit blumig-frischem – an Maiglöckchen erinnerndem – Geruch charakterisiert. Wegen seiner angenehmen Geruchsqualität ist Linalool einer der meistverwendeten Duftstoffe. Dieser acyclischer Terpenalkohol ist Bestandteil vieler ätherischer Öle und Lebensmittel [ROTH und KORMANN, 1997; MARTINETZ und HARTWIG, 1998]. Es zählt in schwarzem Pfeffer, neben einer Reihe anderer Substanzen, zu den Schlüsselaromastoffen. Zudem kommt es auch in Thymian, Basilikum und Zimt, sowie in Kirschsaff, Schwarz- und Grüntee und in Zitrusfrüchten vor. Des Weiteren ist Linalool ein Aromastoff in Bier, zumal es vom Hopfen stammt [BELITZ et al., 2008]. Die SPME-Faser war unmittelbar neben der Bierausschank positioniert, daher ist Bier auch als potentielle Quelle zu nennen. **Nonanal** (37) oder Pelargonaldehyd konnte bei 28.95 Minuten nachgewiesen werden. Dieser aliphatische Aldehyd wurde bereits im Rohkaffee detektiert und weist eine fettig-rosige Geruchsqualität auf [ROTH und KORMANN, 1997]. Nonanal kommt in vielen Blütenkompositionen vor, vorzugsweise in solchen mit Rosencharakter. Außerdem trägt dieser Aldehyd zum Fleischaroma bei, gilt zudem als potenter Aromastoff in Hopfen und kann folglich auch dem Bier zugewiesen werden. Weitere Quellen für den Nonanal-Peak stellen diverse koffeinhaltige Tees, sowie Apfel- und Orangensaft und Eierspeise dar, welche im *Kleinen Café* zu jeder Tageszeit angeboten werden [NIJSSEN et al., 1996; BELITZ et al., 2008].

Das **Maltol** (38) – eine Pyran-Verbindung – wurde bei einer Retentionszeit von 30.03 Minuten nachgewiesen. Es konnte bereits im hochwertigen *Arabica Sidamo* aufgezeichnet werden und weist einen angenehmen süßen-fruchtigen und karamellartigen Geruch auf [STEGLICH et

al., 2000; BELITZ et al., 2008]. Maltol kommt natürlicherweise in Röstkaffee vor und findet sich in größeren Mengen in Malzkaffee. Außerdem wurde es als Aromakomponente in Milch und Kakao identifiziert. Maltol verstärkt den süßen Geschmack von Lebensmitteln, deswegen wird es Getränken zur Süßung bzw. zur Energiereduktion beigesetzt [NIJSSEN et al., 1996; FRANZKE, 1996]. **Menthon** (39) – ein ungesättigtes, monocyclisches Terpenketon – wurde bei  $R_t$  31.92 detektiert. Es kommt natürlicherweise im Pfefferminzöl vor und weist einen typischen Minzgeruch auf. In der Parfümindustrie wird es als Basis für künstliche Pfefferminzöle eingesetzt [ROTH und KORMANN, 1997; STEGLICH et al., 2000]. Bei  $R_t$  32.26 und bei  $R_t$  36.57 konnten **Eucarvon** (40) und **(+)-Carvon** (45) aufgefunden werden. Beim Carvon gibt es zwei Enantiomere; (-)-Carvon und (+)-Carvon. Die (-)-Form riecht minzig und die (+)-Form weist einen an Kümmel und Dillsamen erinnernden Geruch auf [BELITZ et al., 2008]. Diese zwei optischen Isomere werden zum Aromatisieren von Nahrungsmitteln und Getränke verwendet. (+)-Carvon zählt zu den Schlüsselaromastoffen in Kümmel- und Dillöl und ist in Mandarinenschalen enthalten. Vermutlich ist es dem Dillkraut, welches an der Anrichte lag, zuzuschreiben [MARTINETZ und HARTWIG, 1998]. Ein kleiner Peak im Chromatogramm, bei  $R_t$  32.97, stellt **(-)-Menthol** (41) dar. Dieser cyclische Terpenalkohol findet wegen seines charakteristischen Pfefferminzgeruchs als Duft- und Aromastoff Verwendung. Wegen seines kühlenden und erfrischenden Effekts wird es Zahnpasten, Mundwässer, Kaugummis und Süßigkeiten beigesetzt. Menthol ist natürlicherweise im Tabak enthalten, jedoch geht es während der Fabrikation teils verloren. Um den Tabakgeschmack zu erhalten, wird Menthol nicht nur in Menthol-, sondern auch in herkömmliche Zigaretten als Additiv zugesetzt. Dadurch wird der Zigarettenrauch weicher gemacht, außerdem wird dem Raucher das Gefühl gegeben, freier atmen zu können. [MERCKEL und PRAGST, 2005; MERCKEL und PRAGST, 2007]. Bei  $R_t$  33.90 konnte **Naphthalin** (42) aufgezeichnet werden. Es kommt natürlicherweise in geringen Mengen in Kaffee vor. In die Atmosphäre gelangen die größten Mengen durch unvollständige Verbrennung aus Kraftfahrzeugen, sowie aus Industrie – ebenso aus dem Zigarettenrauch-Nebenstrom [NIJSSEN et al., 1996; HULPKE et al.,



1996].  **$\alpha$ -Terpineol** (43), welches bei  $R_t$  33.98 qualitativ nachgewiesen wurde, weist einen typischen Fliedergeruch auf und findet deshalb in vielen Kosmetika Anwendung. Außerdem gilt dieser cyclische Terpenalkohol als Aromastoff in Röstkaffee, koffeinhaltigen Tees und auch in diversen Gewürzen, z.B. in Pfeffer, Dill und Vanille [NIJSSEN et al., 1996; ROTH und KORMANN, 1997]. **trans-Zimtaldehyd** (44) welcher im GC bei einer Retentionszeit von 36.04 Minuten zum Vorschein kam, existiert als cis- und trans-Form – wobei letztere häufiger vorkommt. Er riecht, wie der Name schon andeutet, stark nach Zimt und ist Hauptbestandteil des Zimtöls. Er wird in vielen Parfümkompositionen verwendet, vor allem für würzige und orientalische Noten. Überdies wird Zimtaldehyd in der Tabakindustrie als Additiv zur Überdeckung des Bittergeschmacks von Nikotin eingesetzt [MARTINETZ und HARTWIG, 1998; MERCKEL und PRAGST, 2005]. Außerdem wurde dieser aromatische Aldehyd im Zigarettenrauch nachgewiesen. Ein Peak mit relativ hoher Intensität bei  $R_t$  38.33 stellt die Schwefelverbindung **tert-Hexadecanthiol** (46) dar. **Indol** (47), welches bei  $R_t$  39.25 detektiert wurde, zeigte sich bereits im *Arabica Sidamo* Chromatogramm mit sehr geringer Intensität. Zusätzlich konnte es auch im Zigarettenrauch-Chromatogramm aufgefunden werden. Indol ist natürlicherweise im Zigarettentabak enthalten, wird aber – da es beim Herstellungsverfahren nahezu vollständig zerstört wird – als Additiv zugesetzt um den Tabakgeschmack zu bewahren. Für den Tabakzusatz von Indol wurde vom Department of Health in London eine maximale Obergrenze von 1 ppm festgelegt [MERCKEL und PRAGST; 2005, MERCKEL und PRAGST, 2007].

Die zur Gruppe der Aromaten zählenden Substanzen, **Methylnaphthalin** (48) und **Dimethylnaphthalin** (54), wurden bei einer Laufzeit von 39.39-40.17 Minuten bzw. 44.60 Minuten aufgezeichnet. Beide Verbindungen existieren als isomere Formen und konnten in dieser Arbeit nicht eindeutig identifiziert werden. Alle zwei wurden bereits im Zigarettenrauch-Chromatogramm nachgewiesen und gelten nach den Autoren *Nijssen et al.* (1996) als Kaffeearomastoffe [NIJSSEN et al., 1996]. **Triacetin** (49; 1,2,3-Propantriolacetat), welches vom Zigarettenrauch stammt, wurde bei  $R_t$  40.52 detektiert. Es wird in Tabakerzeugnissen als Lösungsmittel für Aroma- und

Geschmacksstoffe verwendet und ist zu diesem Zweck in den Tabakverordnungen zugelassen [MERCKEL und PRAGST, 2005]. **Ionon** (50) liegt als  $\alpha$ -,  $\beta$ - und  $\gamma$ -Isomer vor und konnte im Rahmen dieser Untersuchung nicht eindeutig identifiziert werden. Ionone, mit einem an Veilchen erinnernden Geruch, sind in Gemüse und Früchten weit verbreitet, insbesondere in Beerenobst, schwarzem Tee und Orangensaft. Auch in Wein, Bier und Tabak finden sich höhere Konzentrationen dieser Isomeren. Diese cyclischen Terpenoide sind wegen ihrer Geruchsqualität Ingredienzien vieler ätherischer Öle und werden vielfach in der Parfümindustrie eingesetzt [NIJSSEN et al., 1996; BAUER et al., 1997; STEGLICH et al., 2000].  **$\alpha$ -Terpinylacetat** (51), welches im Chromatogramm bei  $R_t$  41.06 aufgefunden wurde, weist als Reinsubstanz Bergamott-Lavendelgeruch auf. In Lebensmitteln kommt es vor allem in Schwarztee, Orangensaft und schwarzem Pfeffer vor. Zudem wird dieser cyclische Terpenester wegen seiner angenehmen Geruchsnote, seiner Stabilität und seines niedrigen Preises vielfach zur Herstellung von Parfüms eingesetzt [NIJSSEN et al., 1996; MARTINETZ und HARTWIG, 1998]. **Nikotin** (52), das Hauptalkaloid der Tabakpflanze, konnte bei  $R_t$  41.44 aufgezeichnet werden. Vergleicht man den Nikotin-Peak im Chromatogramm des *Kleinen Cafés* mit den nachfolgenden Chromatogrammen, so sieht man, dass die Intensität wesentlich geringer ist. Das liegt vermutlich daran, dass das *Kleine Café* durch zwei Eingänge begehbar ist und dadurch mehr Frischluft in die Innenräume gelangt. Drei Alkane, **Tetradecan** (53), **Pentadecan** (56) und **Hexadecan** (58), welche im Kaffee als Aromakomponenten nachgewiesen wurden, konnten bei  $R_t$  42.94,  $R_t$  47.43 bzw.  $R_t$  51.19 detektiert werden. Da diese Kohlenwasserstoffe natürlicherweise in Dill enthalten sind, könnte auch diese Quelle relevant sein und den jeweiligen Peak ausmachen. Wobei zu erwähnen gilt, dass Penta- und Hexadecan auch als Tabakinhaltsstoffe gelten [NIJSSEN et al., 1996; MERCKEL et al., 2006]. **Myosmin** (55), ein Tabakalkaloid, konnte im Chromatogramm des *Kleinen Cafés* bei  $R_t$  45.44 detektiert werden [FRANZKE, 1996]. Ein weiteres Nebenalkaloid im Tabak, das **Nikotyrin** (57), wurde bei einer Laufzeit von 47.85 Minuten erfasst und aufgezeichnet. Es konnte bereits in der Zigarettenrauch-Untersuchung

nachgewiesen werden. Myosmin und Nikotyrin, können ebenfalls ein Suchtpotential, wie Nikotin, besitzen [MERCKEL und PRAGST, 2005].

Ein verschwindend kleiner Peak, bei  $R_t$  51.70, stellt **Phthalsäurediethylester** (59) dar. Dieser Ester wird als Lösungsmittel oder in der Parfümerie als Fixateur verwendet. Da die SPME-Faser nicht weit von der Ausschank entfernt war, könnte eine weitere Quelle Weißwein oder Bier sein, welche diesen Ester als Aromakomponente enthalten [NIJSSEN et al., 1996; MARTINETZ und HARTWIG, 1998]. Am Ende des Chromatogramms – bei 54.08 Minuten – konnte  **$\beta$ -Methylionon** (60) aufgezeichnet werden. Ionone, die einen an Veilchen erinnernden Geruch aufweisen, sind Bestandteile vieler ätherischer Öle, welche Komponenten in Parfüms sein können. Folglich könnte diese Verbindung auch von einem Kaffeehaus-Gast stammen, dessen getragenes Parfüm  $\beta$ -Methylionon als Komponente enthält [BAUER et al., 1997].

#### **4.2.4. Qualitative Auswertung der Innenraumluft des *CAFÉ RITTER***

##### **4.2.4.1. Allgemeines**

Die „Acht-Stunden“-Messung im *Café Ritter* erfolgte am 8. Jänner 2008 in der Zeit von 9.00 Uhr vormittags bis 17.00 Uhr abends. Auch in diesem Wiener Kaffeehaus wurde in unserem Bewertungsbogen Notiz über den Gesamteindruck gemacht. Am Tag der Messung war das Wetter überaus sonnig und für diese Jahreszeit sehr warm; bei 6°C. Der Standort unserer SPME-Faser wurde wiederum so gewählt, dass sie in der Nähe der Kaffeezubereitung sowie im Gästebereich zwischen Raucher- und Nichtraucherzone stand. Dabei wurde das SPME-„Sampling“-Gerät abermals vertikal in ein hohes Wasserglas gestellt und geschützt an einem höheren Podest an der Theke errichtet. Rechts neben der SPME-Faser befand sich das Kuchenbuffet in einer Glasvitrine, daneben stand die Espressomaschine.

Am Vormittag – zwischen 8.00 Uhr und 11.00 Uhr – wurde der Kaffee zusätzlich auf Wunsch mit einer Filtermaschine zubereitet und in einem Kännchen auf Silbertablett serviert. Für diese Zubereitung wurde die *SPAR*-Marke *Regio* verwendet. Am frühen Vormittag waren die Besucher eher dünn besiedelt, was vermutlich nur so scheinen ließ, da das *Café Ritter* über beachtliche Räumlichkeiten verfügt. Es gilt auch zu erwähnen, dass es in diesem Wiener Kaffeehaus eine „offene“ Trennung zwischen Raucher- und Nichtraucherbereichen gibt. Links vom Eingang ist ein wohl eher dürrtiger Nichtraucherbereich und rechts davon befindet sich die sehr viel größer angeordnete Raucherzone, hier fand auch das meiste Geschehen statt. Am frühen Nachmittag trafen sich hier alteingesessene Herren zum täglichen Kartenspiel, dabei wurden viele Rauchwaren konsumiert. Der „blaue Dunst“ verbreitete sich trotz der hohen Räumlichkeiten im ganzen Kaffeehaus und führte die Nichtraucherzone somit ad absurdum.

Ab dem späten Nachmittag war das *Café Ritter* nahezu voll belegt. Es wurden die unterschiedlichsten Getränke und Speisen bestellt. Die alten Herren am Spieltisch saßen beim Achterl Rotwein und gönnten sich hin und wieder ein Stamperl Schnaps. Natürlich servierte der Herr Ober auch diverse Kaffeespezialitäten und so mancher Gast ließ sich dazu eine von vielen kulinarischen Mehlspeisen bringen.

Gegen Abend wurde auch so manches Spiel an den Billardtischen – links neben der Nichtraucherzone – gewagt.

Bei auffälligen Fremdgerüchen wurde im Bewertungsbogen nur vermerkt, dass es hin und wieder nach unterschiedlichem Parfüm roch. Der wohlriechende Kaffeeduft wurde, mit Ausnahme man stand direkt vor der Espressomaschine, zu keinem Zeitpunkt der Messung olfaktorisch wahrgenommen.

Nach den acht Stunden Messung wurde die Faser sichergestellt und wie schon bewährt in das GC-MS eingebracht. Anschließend wurde das Chromatogramm mit der WILEY- und NIST-Datenbank verglichen und ausgewertet. Zudem wurde das Chromatogramm der Raumluft des *Café Ritters* mit jenen der Kaffeegetränke, dem des Tabakrauchs sowie mit den anderen Kaffeehäusern verglichen, um daraus Schlüsse ziehen zu können. Für die im Kaffeehaus aufgefundenen Substanzen wurden wiederum die Liste nach *Nijssen et al.* (1996), sowie Arbeiten von *Merckel* und *Pragst* (2005, 2006 und 2007), als auch Literaturwerke der Aroma-, Duft- und Riechstoffchemie herangezogen.

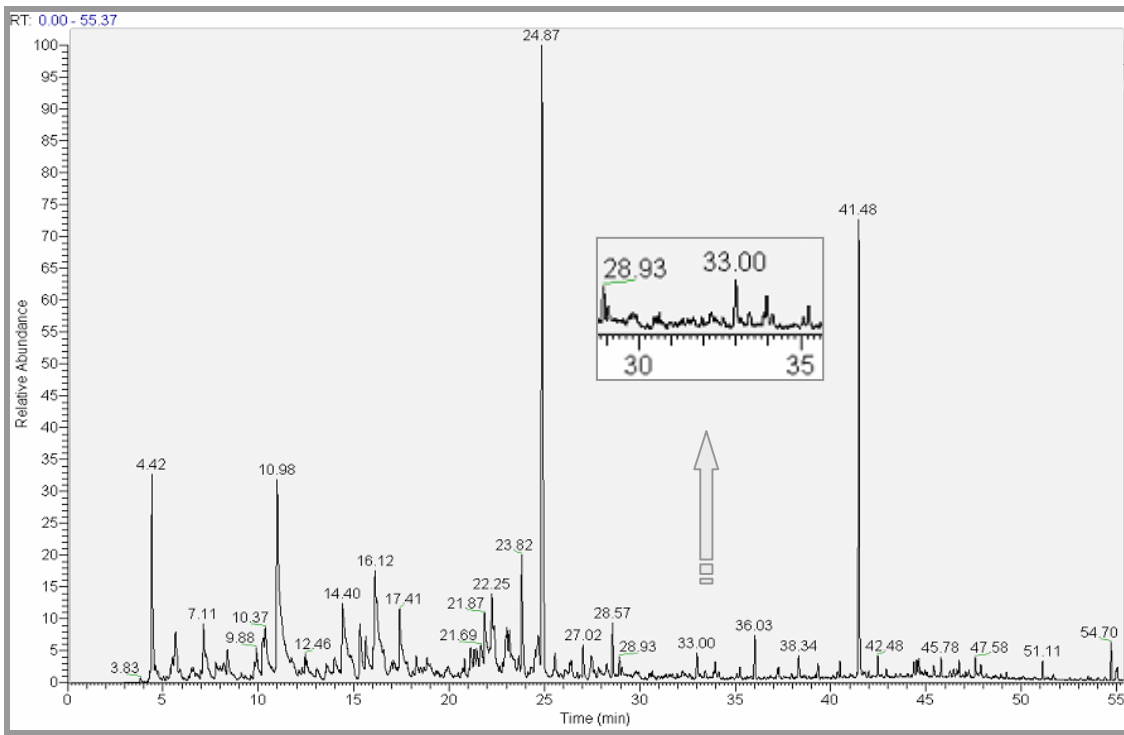


Abbildung 23 Chromatogramm: Café Ritter; 8-Stunden-Messung  
mittels SPME-Faser

#### 4.2.4.2. Auswertung des „Acht-Stunden“-Chromatogramms

Im voran stehenden Chromatogramm (Abbildung 23) sind etwa 300 Substanzen aufgezeichnet worden, davon wurden die für dieses Wiener Kaffeehaus wesentlichsten Stoffe herausgegriffen (siehe Tabelle 18) und zur Interpretation herangezogen. Substanzen, die im Zigarettenrauch-Ausschlusstest bereits zum Nachweis kamen, wurden in der unten angeführten Tabelle wiederum mit einen „x“ gekennzeichnet. Verbindungen, die laut *Nijssen et al.* (1996) dem Kaffeearoma zuzuschreiben sind, wurden „fett“ untermauert.

Aufgefundene Substanzen, welche beispielsweise als Kaffeearomastoffe bzw. als Tabak-Ingredienzien nachgewiesen wurden, können zugleich von anderen Quellen – unter anderem von Parfüms sowie von angebotenen Speisen und Getränken – stammen und somit einen Peak ausmachen bzw. verstärken.

Substanzen, welche im *Kleinen Café* bereits nachgewiesen, folgedessen im Abschnitt 4.2.3.2 ausführlich diskutiert wurden, werden in diesem Teil der

Arbeit nicht mehr näher behandelt, sondern es wird auf den vorangehenden Abschnitt verwiesen. Diese Substanzen sind in der nachfolgenden Tabelle mit dem Kleinbuchstaben „<sup>k</sup>“, welcher für „*Kleines Café*“ steht, gekennzeichnet.

*Tabelle 18 Substanzen der achtstündigen Raumlufbmessung im Café Ritter  
mittels HS-SPME-GC-MS*

Nr.	R <sub>t</sub> (min)	Substanz*	Synonym	Zig.
1	3,83	<b>Acrolein</b>	2-Propenal, Acrylaldehyd	x
2	4,42	<b>1,3-Pentadien</b> <sup>k</sup>	Piperylen	x
3	5,50	<b>Amylalkohol</b>	1-Pentanol	
4	5,62	<b>2- und 3-Methylfuran</b> <sup>k</sup>		x
5	7,11-7,30	<b>Benzol</b>		x
6	8,39	<b>2,5-Dimethylfuran</b> <sup>k</sup>		x
7	9,88-10,24	<b>Pyridin</b> <sup>k</sup>	Azin, Azabenzol	x
8	10,37	<b>Pyrrol</b> <sup>k</sup>	Pyrrolin	x
9	10,98	<b>Toluol</b>	Methylbenzol	x
10	12,46	2-Borneol	Bornylalkohol	
11	13,62	<b>Methylpyridin</b> <sup>k</sup>	α- und β-Picolin	x
12	14,40	<b>Furfural</b> <sup>k</sup>	Furancarboxyaldehyd	x
13	15,32	<b>2-Furfurylalkohol</b> <sup>k</sup>	2-Furanmethanol	x
14	15,62	<b>Ethylbenzol</b>	Phenylethan	x
15	15,71-16,12	<b>Xylol</b>	Dimethylbenzol, o-, m- p-Xylol	x
16	17,41	<b>Styrol</b> <sup>k</sup>	Vinylbenzol, Ethenylbenzol	x
17	18,08	Myrtenal	Pin-2-ene-1-carbaldehyd	x
18	18,49	<b>Acetylfuran</b> <sup>k</sup>	2-Furylmethylketon	
19	19,43	(+)-Sabinen	4(10)-Thujen	
20	19,83	Myrtenol		x
21	21,12	<b>Ethyltoluol</b> <sup>k</sup>	<b>m-Ethyltoluol</b> ; auch o- und p-	x
22	21,29	<b>1,2,4-Trimethylbenzol</b> <sup>k</sup>	Pseudocumen	x
23	21,32	<b>1,3,5-Trimethylbenzol</b> <sup>k</sup>	Mesitylen	x
24	21,45	<b>5-Methylfurfural</b> <sup>k</sup>	5-Methylcarboxaldehyd	
25	21,69	<b>Benzaldehyd</b> <sup>k</sup>	Benzcarbaldehyd	x
26	21,87	3-Ethenylpyridin	3-Vinylpyridin	
27	22,00	4-Ethenylpyridin	4-Vinylpyridin	
28	22,25	<b>Phenol</b> <sup>k</sup>		x
29	22,81	<b>Decan</b> <sup>k</sup>		
30	23,67	Ocimen		
31	23,82	α-Terpinen	Mentha-1,3-dien	
32	24,12	Nikotinaldehyd	Acetyloxim	x
33	24,28	Nikotinnitril	4-Pyridinnitril; 4-Cyanopyridin	x
34	24,61	1,2,3-Trimethylbenzol <sup>k</sup>	Hemellit	x
35	24,87	<b>(+)-Limonen</b> <sup>k</sup>	1,8-p-Menthadien	x
36	26,50	Tetramethylbenzol	<b>Durol</b> , Prehnitol, Isoduro	
37	27,02	Dihydromyrcenol	2,6-Dihydro-7-octen-2-ol	
38	27,14	<b>2-Acetylpyrrol</b> <sup>k</sup>	Methyl-2-acetylpyrrol	
39	27,46	<b>Methylphenol</b> <sup>k</sup>	Kresol	x
40	27,61	p-Cymol	p-Isopropyltoluol	
41	28,36	<b>p-Cymenol</b>	1-Isopropenyl-4-methylbenzol	
42	28,57	<b>(+/-)-Linalool</b> <sup>k</sup>	3,7-Dimethyl-1,6-octadien-3-ol	
43	28,93	Nonanal <sup>k</sup>	Pelargonaldehyd	
44	29,79	<b>2-Phenylethanol</b>	β-Hydroxyethylbenzol, Rosenöl	
45	31,96	Menthon	2-Isopropyl-5-methylcyclohexanon	
46	33,00	(-)-Menthol	2-Isopropyl-5-methylcyclohexanol	
47	33,89	<b>Naphthalin</b> <sup>k</sup>		



Fortsetzung Tabelle 18

Nr.	R <sub>t</sub> (min)	Substanz*	Synonym	Zig.
48	33,96	<b>α-Terpineol</b> <sup>k</sup>		
49	35,09	Citronellylacetat	Essigsäurecitronellylester	
50	35,21	β-Citronellol	Rhodinol	
51	35,62	<b>5-Hydroxymethylfurfural</b>	HMF	
52	36,03	trans-Zimtaldehyd	3-Phenyl-2-Propenal	x
53	36,10	Bergamol	Linalylacetat	
54	39,22	<b>Indol</b> <sup>k</sup>	Benzopyrrol	x
55	40,10-40,14	<b>Methylnaphthalin</b> <sup>k</sup>	versch. Isomere	x
56	40,49	Triacetin <sup>k</sup>	1,2,3-Propantrioltriacetat, Enzactin	x
57	41,02	α-Terpinylacetat <sup>k</sup>		
58	41,38	Solanon		
59	41,48	(S)-Nikotin	1-Methyl-2-(3-pyridinyl)-pyrrolidin	x
60	42,00	α-Cubeben		
61	42,48	Copaen	Aglain	
62	42,92	<b>Tetradecan</b> <sup>k</sup>		
63	44,36	(+)-Lonigfolen	Kuromatsuen, Junipen	
64	44,50	Nopylacetat	Essigsäurenopylester	
65	44,63	β-Caryophyllen	auch trans-	
66	44,99	<b>Dimethylnaphthalin</b> <sup>k</sup>	versch. Isomere	x
67	45,78	Myosmin	3-(3,4-Dihydroxy-2H-pyrrol-5-yl)Pyridin	
68	47,26	<b>Pentadecan</b> <sup>k</sup>		x
69	47,58	Nikotyrin	1-Methyl-2-(3-pyridyl)pyrrol	x
70	48,50	α-Cedren		
71	48,65	β-Cadinen		
72	51,11	<b>Hexadecan</b> <sup>k</sup>		
73	51,67	Phthalsäurediethylester <sup>k</sup>	Diethylester, Diethylphthalat	
74	54,70	unbekannte Substanz		

\* Übereinstimmung in NIST und WILEY: > 80 %; <sup>k</sup> verweise auf Abschnitt 4.2.3.2

Hier im Chromatogramm ist der Peak mit höchster Intensität bei R<sub>t</sub> 24.87 **(+)-Limonen** (35). Wesentlich höher, verglichen mit dem Chromatogramm des *Kleinen Cafés*, ist auch der **(S)-Nikotin**-Peak (59). Er stellt im Chromatogramm des Vorstadtcafés bereits den zweithöchsten Peak, bei R<sub>t</sub> 41.48, dar. Nikotin kommt ausschließlich als (S)-Enantiomer vor, die (R)-Form in seiner Wirkung ist inaktiv [MERCKEL und PRAGST, 2005]. Da in diesem Wiener Kaffeehaus die Zigarettenbelastung am Tag der Messung enorm groß war, fällt auch der Peak des Haupttabakalkaloids demgemäß stark aus. Ein weiterer hoher Peak im Chromatogramm des *Café Ritter*, bei einer Laufzeit von 10.98 Minuten, ist **Toluol** (9). Neben **Benzol** (R<sub>t</sub> 7.11-7.30; 5), **Ethylbenzol** (R<sub>t</sub> 15.62; 14) und **Xylol** (R<sub>t</sub> 15.71-16.12; 15) gehört Toluol zu den so genannten BTEX-Aromaten. Diese Verbindungen gehören zu den standardmäßig erfassten Verbindungen

bei Innenraumluft-Untersuchungen, da sie ubiquitär anzutreffen sind und zudem in beträchtlichen Mengen als Lösungsmittel Einsatz finden. Außerdem sind diese Aromaten vielfach in Lebensmitteln enthalten. Diesbezüglich erwähnenswert sind Eierspeise oder Spiegeleier, welche bereits früh morgens zum Frühstück in Form von „ham and eggs“ serviert wurden [NIJSSEN et al., 1996].

Vorneweg, der erste – sehr schwache – Peak im Chromatogramm bei  $R_t$  3.83 stellt das **Acrolein** (1), anders 2-Propenal, dar. Es entsteht bei Verbrennungsprozessen und kommt in Innenräumen hauptsächlich als Inhaltsstoff des Tabakrauchs vor. Acrolein bildet sich als Pyrolyseprodukt bei der thermischer Zersetzung aus dem als Feuchthaltemittel zugesetzten Glycerol [MERCKEL und PRAGST, 2005 und 2007]. Zudem ist dieser Aldehyd eine Aromakomponente des Röstkaffees und konnte ebenfalls im Zigarettenrauch-Ausschlusstest nachgewiesen werden. In Lebensmitteln findet es sich in höheren Konzentrationen in Pommes frites, in Apfelsaft, Bier und Schwarztee, somit könnten diese Speisen und Getränke auch infrage kommen [NIJSSEN et al., 1996]. **Amylalkohol** (3), oder 1-Pentanol, welcher als eine natürliche Aromakomponente im Röstkaffee erörtert wurde, tauchte bei einer Retentionszeit von 5.50 Minuten auf. Zusätzlich ist Amylalkohol Komponente von Körperausdünstungen und kann sich somit in bedeutsamen Konzentrationen in der Raumluft finden [PLUSCHKE, 1996]. Da beim „Schnapsen“ stets um Geld gespielt wurde, ist es durchaus denkbar, dass so mancher Gast ordentlich ins Schwitzen kam und zur Amylalkohol-Belastung beitrug. Bei  $R_t$  12.46 kam es zum Nachweis von **2-Borneol** (10), einem bicyclischen Terpenalkohol. Borneol zeigt einen kampferartigen Geruch mit einer leicht scharfen erdig-pfeffrigen Geruchsqualität. Es kommt in der Natur häufig vor, besonders in Rosmarin- und Lavendelöl, welche Verwendung als Parfümkomponenten finden. Außerdem kommt es natürlicherweise in der Ingwerwurzel vor, und könnte somit auch von einem an der Bar aufgegossenen Ingwertee stammen. Des Weiteren wurde es in bedeutsamen Konzentrationen in Pfeffer und Rosmarin nachgewiesen, auch in Kakao, Schwarztee und Bier konnte es von den Autoren *Nijssen et al.* (1996) als Aromastoff identifiziert

werden. Borneol ist auch Bestandteil des Terpentins, welches gerne in der Riechstoff-Industrie verwendet wird und in diversen Reinigungsmitteln als Lösungsmittel Einsatz findet [NIJSSEN et al., 1996; MARTINETZ und HARTWIG, 1998; BELITZ et al., 2008]. Überdies wurde Borneol als Tabakzusatzstoff im Zigarettenrauch nachgewiesen [MERCKEL und PRAGST, 2005]. Zwei cyclische Terpenverbindungen, **Myrtenal** (17) und **Myrtenol** (20) konnten bei  $R_t$  18.08 bzw.  $R_t$  19.83 aufgezeichnet werden. Beide Verbindungen wurden schon im Zigarettenrauch-Test beschrieben. Bedeutsame Konzentrationen befinden sich auch in den Gewürzen Vanille und Pfeffer und können somit als potentielle Quelle in Betracht gezogen werden [NIJSSEN et al., 1996]. **(+)-Sabinen** (19), welches bei  $R_t$  19.43 aufgezeichnet wurde, ist Inhaltsstoff vieler ätherischer Öle. Unter anderem ist es Bestandteil des Kubeben-, des Pfeffer- und des Thujaöls, welche in Parfümkompositionen eingesetzt werden. Außerdem konnte es in Orangensaft und Bier sowie in schwarzem Pfeffer aufgefunden werden. Da die SPME-Messfaser in der Nähe der Ausschank stand, kommen diese Getränke natürlich auch als Sabinen-Quelle infrage [NIJSSEN et al., 1996].

Mit geringer Intensität konnten im Chromatogramm bei  $R_t$  21.87 und  $R_t$  22.00 **3-** und **4-Vinylpyridin** (26 und 27) detektiert werden. Beide Isomere kommen als natürliche Aromakomponenten in Kakao vor, welcher am Messtag – vorzugsweise vormittags – mehrmals im Barbereich zubereitet wurde [NIJSSEN et al., 1996]. Im Chromatogramm bei  $R_t$  23.67 scheint der Peak für **Ocimen** (30), einem ungesättigten acyclischen Monoterpen, auf. Ocimen existiert in  $\alpha$ - und  $\beta$ -Form, die Struktur konnte im Rahmen dieser Arbeit nicht aufgeklärt werden. Beide Formen finden Verwendung als Duftstoff und kommen natürlicherweise in vielen Lebensmitteln vor. Erwähnenswert sind hier Grün- und Schwarztee, welche oftmals vom Herrn Ober an der Bar aufgegossen und serviert wurden [NIJSSEN et al., 1996; STEGLICH et al., 2000].  **$\alpha$ -Terpinen** (31), ein cyclisches Terpen, konnte im Chromatogramm des *Café Ritter* bei  $R_t$  23.82 aufgezeichnet werden. Dieses Terpen konnte bereits im Rohkaffee *Robusta Madagaskar* nachgewiesen werden. Außerdem kommt es in koffeinhaltigen Tees, vor allem in Schwarztee und Orangensaft vor, welche

auch für diesen Peak verantwortlich sein können. Zudem ist  $\alpha$ -Terpinen Bestandteil des Terpentinöls sowie anderer ätherischer Öle, welche in Parfüms verwendet werden [NIJSSEN et al., 1996; ROTH und KORMANN, 1997]. **Nikotinaldehyd** (32), bei  $R_t$  24.12 gefolgt vom **Nikotinnitril** (33), bei  $R_t$  24.28 sind Verbindungen die vom Tabakrauch herrühren, der Nachweis konnte mit dem Zigarettenrauch-Test erbracht werden. Der kleine Peak bei  $R_t$  26.50 wurde dem **Tetramethylbenzol** (36) (Durol oder Prehnitol oder Isodurol – deren isomere Form nicht aufgeklärt werden konnte) zugeordnet. Durol, als einziges dieser aromatischen Verbindungen, kommt natürlicherweise als Kaffeearomastoff vor [NIJSSEN et al., 1996]. **Dihydromyrcenol** (37), eine Verbindung mit frischem Zitronengeruch und Lavendelnuancen wurde bei 27.02 Minuten aufgezeichnet. Es wird vor allem für Seifenparfüms mit Limetten- und Blütendüfte eingesetzt [STEGELICH et al., 2000]. **2-Acetylpyrrol** (38), mit einem an Weißbrotkruste erinnernden Geruch, wurde bei  $R_t$  27.14 detektiert und gilt als Aromastoff in Kaffee. Weitere Lebensmittel, welche Acetylpyrrol in bedeutsamer Konzentration enthalten, sind Pommes Frites und gebratenes Fleisch, welche zu Mittag häufig bestellt und serviert wurden. Des Weiteren findet es sich in Röstzwiebeln, die in Form einer Zwiebelsuppe aufgetischt wurden und somit als relevante Acetylpyrrol-Quelle gilt [NIJSSEN et al., 1996; BELITZ et al., 2008]. Außerdem wurde Acetylpyrrol von den Autoren *Merckel et al.* (2006) als Substanz in Zigaretten nachgewiesen [MERCKEL et al., 2006]. Die im Chromatogramm mit geringer Intensität detektieren Verbindungen, **p-Cymol** ( $R_t$  27.61; 40) und **p-Cymenol** ( $R_t$  28.36; 41), weisen einen Thymian-ähnlichen Geruch auf und sind Bestandteile vieler ätherischer Öle, beispielsweise des Thymianöls und der Origanumöle. Zudem wurde Cymenol von den Autoren *Nijssen et al.* (1996) als Aromastoff des Kaffees charakterisiert. Cymenol existiert als 2- (Carvacrol) und 3-Isomer (Thymol); beide Formen werden wegen des würzigen Geschmacks dem Tabak als Additiv beigesetzt. Cymenol ist in höheren Konzentrationen in Orangensaft, Schwarztee, Rot- und Weißwein enthalten. Außerdem findet es sich in Dillkraut und Rosmarin sowie in Spuren in Vanille, welche zum Würzen und Verfeinern einiger Speisen verwendet werden [NIJSSEN et al., 1996; MERCKEL und

PRAGST, 2007]. Cymol ist wiederum Bestandteil des als Lösungsmittel verwendeten Terpentins [ROTH und KORMANN, 1997]. Ein deutlicher Peak, bei  $R_t$  28.57 zeigt **2-Phenylethanol** (44), ein aromatischer Alkohol mit mildem Rosengeruch, konnte bei einer Laufzeit von 29.79 Minuten aufgezeichnet werden. 2-Phenylethanol, bekannt als Rosenöl, zählt zu den Hauptinhaltsstoffen des Rosenöls und findet sich somit in vielen Duftkompositionen, besonders vom Rosen- bzw. Blumentyp. Daneben ist dieser aromatische Alkohol eine flüchtige Komponente im Kaffee und konnte auch in vielen anderen Lebensmitteln identifiziert werden. Es kommt natürlicherweise in Orangen- und Apfelsaft sowie in Wein und Bier vor. Auch in Milch und Milchprodukten, sowie in Kakao spielt Phenylethanol eine Rolle als Aromastoff [NIJSEN et al., 1996; ROTH und KORMANN, 1997]. Des Weiteren konnte es in verschiedenen Zigarettenmarken als Zusatzstoff identifiziert werden, welches bei Verbrennung das karzinogene Styrol bilden kann [MERCKEL und PRAGST, 2005].

Die beiden cyclischen Monoterpene, **Menthon** (45) und **Menthol** (46), wurden bei  $R_t$  31.96 bzw.  $R_t$  33.00 nachgewiesen. Beide Verbindungen sind Bestandteile des Zigarettenrauchs, zumal sie aufgrund ihrer minzigen Geruchsqualität dem Tabak beigelegt werden. Wobei zu erwähnen gilt, dass Menthol auch natürlicherweise im Tabak vorhanden ist [MERCKEL und PRAGST, 2007]. Da sie auch häufig in ätherischen Ölen anzutreffen sind, sind sie nicht nur auf den Tabakrauch zurückzuführen. In nennenswerten Mengen kommen sie hauptsächlich in Minze-Ölen vor, deren Verwendung für Duftkompositionen mit Minze-Noten ist. Zudem wurden beide Verbindungen in Kakao und Honig identifiziert, welche am Tag der Messung – hauptsächlich in der ersten Tageshälfte – konsumiert wurden und somit als potentielle Quellen möglich sind [NIJSEN et al., 1996; ROTH und KORMANN, 1997]. Menthol ist auch eine Komponente des Terpentins [PLUSCHKE, 1996]. **Citronellylacetat** (49), eine Verbindung mit angenehmen frisch-fruchtigen und mildem Rosengeruch, konnte bei  $R_t$  35.09 nachgewiesen werden. Dieser Terpenester wird vor allem als Duftstoff für Rosen-, Lavendel- oder Geranium-Noten eingesetzt. Außerdem kommt es in bedeutsamer Konzentration in

säurebetonten Lebensmitteln und Getränken vor. Höhere Citronellylacetat-Gehalte weisen Tomaten, Orangensaft, Bier und Weißwein auf [NIJSSEN et al., STEGLICH et al., 2000]. Gleich darauf, bei  $R_t$  35.21 kam es zur Detektion von  **$\beta$ -Citronellol** (50) – oder auch Rhodinol – welches ebenfalls einen rosenähnlichen Geruch aufweist. Dieser Terpenalkohol ist der Hauptinhaltsstoff des bulgarischen Rosenöls und eine Komponente des bereits mehrfach erwähnten Terpentins. In höheren Konzentrationen findet er sich in Orangensaft und Schwarztee, welche als Quelle infrage kommt, da die SPME-Faser in der Nähe der Ausschank positioniert war [NIJSSEN et al., 1996; ROTH und KORMANN, 1997]. Ein Peak mit schwacher Intensität, bei  $R_t$  35.62, stellt das **5-Hydroxymethylfurfural** (51) dar. Dabei handelt es sich um eine Verbindung mit kamilleähnlichem Geruch. Hydroxymethylfurfural kommt natürlicherweise im Kaffee vor und wurde auch im Tabak nachgewiesen. Außerdem konnte es von den Autoren *Nijssen et al.* (1996) auch in Kakao und Milch sowie in Bier und Wein identifiziert werden. Des Weiteren zählt diese Furanverbindung zu den Aromakomponenten von gerösteten Zwiebeln, welche oftmals als Zwiebelsuppe – vor allem mittags – serviert wurde [NIJSSEN et al., 1996; MERCKEL et al., 2006]. **trans-Zimtaldehyd** (52), welcher bei einer Laufzeit von 36.03 Minuten aufgezeichnet wurde, hat vielerlei Ursprungsquellen. Die Verbindung ist Bestandteil etlicher ätherischer Öle. Unter anderem Hauptbestandteil des Cassia- und Zimtrindenöls; daneben wurde sie auch im bulgarischen Rosenöl nachgewiesen [MARTINETZ und HARTWIG, 1998]. Verwendung findet dieser aromatische Aldehyd auch als Bestandteil vieler Blütenkompositionen, vor allem in Parfüms und Deodorants [ROTH und KORMANN, 1997]. Die in der Natur häufiger vorkommende trans-Form wird oftmals als Aromastoff Zigaretten zugesetzt. Zimtverbindungen können Styrol erzeugen, welches im Verdacht steht, krebserregend zu sein [MERCKEL und PRAGST, 2005]. Die Höhe des Zimtaldehyd-Peaks – verglichen mit dem des *Kleinen Cafés* – ist im Chromatogramm des Vorstadtkafés um einiges stärker ausgeprägt. Nahe liegend ist hier die starke Zigarettenrauchbelastung. Der Nachweis konnte mit dem Zigarettenrauch-Ausschlusstest erbracht werden. Ein weiterer Peak mit schwacher Intensität stellt **Bergamol** (53), bzw. Linalylacetat,

dar. Diese Esterverbindung, welche im Bergamottminzöl vorkommt, konnte bei  $R_t$  36.10 aufgezeichnet werden. Dieses Öl – mit frischem Geruch – weist als Hauptkomponenten Linalool und Linalylacetat auf. In der Lebensmittelindustrie wird das Bergamottminzöl zur Aromatisierung von Süß- und Backwaren verwendet. Bergamol kommt auch in Getränken, wie Orangensaft und Schwarztee vor, außerdem wurde es in Pfeffer und Rosmarin nachgewiesen [NIJSSEN et al., 1996; ROTH und KORMANN, 1997]. Ein kleiner Peak, bei  $R_t$  41.38, stellt **Solanon** (58) dar. Es ist ein natürlicher Tabakbestandteil, dessen Konzentration von Herkunft und Fermentationsprozessen abhängig ist [STEGLICH et al., 2000; MERCKEL et al., 2006]. Bei  $R_t$  42.00 und  $R_t$  42.48 konnten zwei Terpenverbindungen,  **$\alpha$ -Cubeben** (60) und **Copaen** (61), identifiziert werden. Beide Verbindungen kommen natürlicherweise in ätherischen Ölen vor. Außerdem konnten sie in Orangensaft, Grüntee und Bier (aus Hopfen) nachgewiesen werden. Zudem wurden Cubeben und Copaen auch in Pommes Frites identifiziert, welche täglich einige Male vom Kellner serviert wurden und somit ebenso als relevante Quelle infrage kommt [NIJSSEN et al., 1996; MARTINETZ und HARTWIG, 1998]. Eine weitere Terpenverbindung, **(+)-Longifolen** (63) oder auch Junipen, konnte bei  $R_t$  44.36 detektiert werden. Longifolen kann wiederum auf Terpentinöl zurückgeführt werden, welches als Lösungs- oder Reinigungsmittel Verwendung findet. Bei  $R_t$  44.50 kam es zum Nachweis von **Nopylacetat** (64), einem cyclischen Terpenester. Dabei handelt es sich um eine Verbindung mit einer frischen, fruchtig-holzigen Geruchsnote. Nopylacetat ist ein künstlicher Ester, welcher vorwiegend in Parfüms von Seifen und Haushaltserzeugnissen eingesetzt wird [ROTH und KORMANN, 1997]. Bei 44.63 Minuten konnte  **$\beta$ -Caryophyllen** (65), ein cyclisches Terpen, aufgezeichnet werden. Es weist einen nelkenähnlichen Geruch auf und ist Hauptbestandteil des Nelkenöls. Wegen seines würzigen Geruchs wird Nelkenöl in der Parfümerie vor allem für orientalische Duftnoten verwendet. Überdies wird das Nelkenöl auch zur Aromatisierung von Tabakwaren eingesetzt. Caryophyllen kommt in Grün- und Schwarztee sowie in Dill und Rosmarin vor. Außerdem entsteht es beim Braten von Fleisch und Fleischprodukten und könnte somit auch von den „Bernerwürsteln“ stammen,

welche zur Mittagszeit von so manchem Gast verzehrt wurden [NIJSSEN et al., 1996; MARTINETZ und HARTWIG, 1998]. Die Tabaknebenalkaloide, **Nikotyrin** (67) und **Myosmin** (69) scheinen deutlich bei einer Analysezeit von 45.78 und 47.58 Minuten auf. Beide Alkaloide können schon bei geringeren Nikotinkonzentrationen ein eigenes Suchtpotential bergen [MERCKEL und PRAGST, 2005]. Die Intensitäten beider Verbindungen sind höher als im Chromatogramm des *Kleinen Cafés*. Bei  $R_t$  48.50 konnte  **$\alpha$ -Cedren** (70) detektiert werden. Dieses tricyclische Sesquiterpen kommt vor allem im Zedernholzöl vor, welches gerne – aufgrund des holzigen Duftprofils – in Herrenparfüms verwendet wird. Eine wichtige Rolle spielt Cedren als Aromastoff im schwarzen Pfeffer sowie in koffeinhaltigen Tees, welche mehrfach am Messtag vom Kellner an der Bar aufgegossen wurden.  **$\beta$ -Cadinen** (71), ein bicyclisches Terpen, konnte bei  $R_t$  48.65 aufgezeichnet werden. Es kommt in vielen ätherischen Ölen, insbesondere im Kamillen-, Terpentin- und Ingweröl, vor. Diese Öle werden vielseitig in der Parfümerie für Gewürz- oder orientalische Noten eingesetzt. Eine bedeutende Rolle spielt es in den Getränken Orangensaft und Grüntee, in welchen es in der Liste nach *Nijssen et al.* (1996) als Aromastoff angeführt ist. Außerdem kommt Cadinen in vielen Gewürzen, vor allem in Rosmarin und Pfeffer vor und könnte somit auch aus dieser Quelle stammen [NIJSSEN et al., 1996; ROTH und KORMANN, 1997].



#### **4.2.5. Qualitative Auswertung der Innenraumluft der CAFÉ-KONDITOREI AIDA**

##### **4.2.5.1. Allgemeines**

Die achtstündige Raumluft-Messung der Café-Konditorei *Aida* in der Filiale Wollzeile im 1. Bezirk fand am 6. Jänner 2008, in der Zeit von 9.00 Uhr vormittags bis 17.00 Uhr abends statt. Auch in dieser Wiener Kaffeehaus-Institution wurden, unter Zuhilfenahme des Bewertungsbogens, einige interessante Details notiert. Das Wetter lieferte beste Voraussetzung für einen Kaffeehaus-Besuch – es war sehr kalt, windig und zudem getrübt vom Nebel. Die Position des SPME-„Sampling“-Geräts wurde wiederum so gewählt, dass sie zentral gelegen im Gästebereich und nicht weit von der Kaffeezubereitung war. Dabei wurde der Faserhalter, mit ausgefahrener Fused-Silica-Faser, erneut in ein hohes Wasserglas gegeben und für die „Acht-Stunden“-Messung in Position gebracht. Weiters wurde die SPME-„Apparatur“, geschützt vor ungewolltem Zugriff, auf einem hoch gelegenen Wandregal deponiert.

Links davon war ein reichhaltiges Mehlspeisen-Buffer hinter einer Glasvitrine angerichtet. Die Auswahl war unglaublich groß, es reichte von kalorienreichen Torten bis hin zu mürben Kuchen und traditionellen Strudeln. In der Mitte vom Raum befand sich das Herzstück der *Aida*-Filiale, die Espressomaschine. Hier bereitete eine der Kellnerinnen Kaffeespezialitäten *à la Aida* zu, welche sie den Gästen auf Silbertablets servierte. Ein Stück Mehlspeise war meist mit am Tablett.

Beim Eintritt ins Kaffeehaus war das wohl duftende Kaffeearoma ausgesprochen gut wahrnehmbar, welches auch gleich darauf vom Zigarettengeruch getrübt wurde. Rechts vom Eingang standen die Tische, an denen nach Belieben geraucht wurde oder auch nicht. In diesem kleinen Raum gab es keine klare Trennung zwischen Raucher- und Nichtraucherbereichen. Ein paar Schritte weiter – vorbei am Stehkafee – konnte der Kaffeeduft wieder

aufgespürt werden. Hauptsächlich werden die Kaffeespezialitäten mit der Espressomaschine zubereitet, doch auf Wunsch wird auch Filterkaffee serviert. Im Rahmen dieser Untersuchung ist die *Aida* das einzige Wiener Kaffeehaus, welches ihren Kaffee in einem bestimmten Verhältnis verschiedener *Arabica*-Bohnen mischt und in Wien selber röstet.

In dieser *Aida*-Filiale herrscht, unabhängig von der Tageszeit, ein ständiges Kommen und Gehen. Größtenteils sind hier Herrschaften der älteren Generation anzutreffen, da sich die Räumlichkeit seit den 50er Jahren nicht nennenswert verändert hat und so manchen Gast in Erinnerungen an die „gute alte“ Zeit schwelgen lässt. Die *Aida*-Filiale in der Wollzeile ist von früh bis spät voll ausgelastet. In der ersten Tageshälfte des Messtages kamen wiederholt Handwerker auf eine „geschwinde“ Vormittagsjause – bestehend aus *Aida*-Melange und einer „Topfengolatsche“ – vorbei. Nachmittags fanden sich etliche junge Leute ein, welche in Ruhe einen Kaffee genossen und dazu eine Mehlspeise aßen.

Nach der achtestündigen Messdauer wurde die SPME-Faser zur Analyse ins Riechstofflabor gebracht. Am GC-MS wurde wiederum die bewährte Methode eingestellt, um die an der Faser anhaftenden Substanzen in den GC-MS einbringen zu können. Anschließend wurde das „Acht-Stunden“-Chromatogramm der *Aida*-Filiale mit den Spektrenbibliotheken von WILEY und NIST ausgewertet und durch Gegenüberstellung mit den voran stehenden Chromatogrammen verglichen. Unter Zuhilfenahme der Aromastoff-Listen nach *Nijssen et al.* (1996) und der Zigarettenrauch-Messung konnten einige Substanzen identifiziert und zugeordnet werden. Des Weiteren waren auch hier die Chromatogramme der Kaffeegetränke mit sämtlichen Kaffeearomastoffen – die zum Teil in den Kaffeehaus-Chromatogrammen nachgewiesen wurden – sehr hilfreich. Um weitere Schlüsse ziehen zu können, wurden aufliegende Literaturwerke der Duft-, Riech- und Aromastoffchemie herangezogen. Zudem waren auch hier die Studien von *Merckel* und *Pragst* (2005, 2006 und 2007) bezüglich Zigaretten-Additive für diese Untersuchung sehr hilfreich.

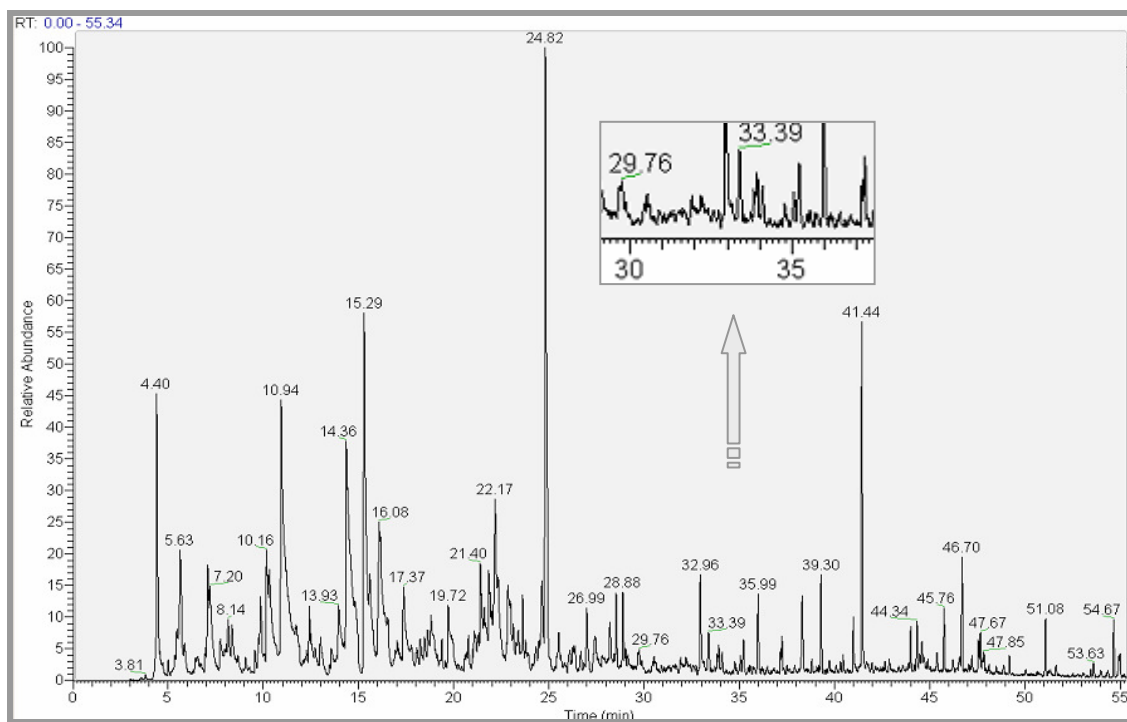


Abbildung 24 Chromatogramm: Café-Konditorei Aida; 8-Stunden-Messung  
mittels SPME-Faser

#### 4.2.5.2. Auswertung des „Acht-Stunden“-Chromatogramms

Dichte Peaks drängen sich im „Acht-Stunden“-Chromatogramm (Abbildung 24) der *Aida*-Filiale aneinander. Augenmerklich kann man bereits erkennen, dass hier sehr viele Substanzen aufgefunden wurden. Es konnten etwa 370 flüchtige Stoffe, die sich größtenteils auf Kaffeearomastoffe, auf Bestandteile des Zigarettenrauchs und der Mehlspeisen oder auf Parfüm-Komponenten zurückführen lassen, detektiert werden. Die repräsentativsten Stoffe wurden herausgegriffen und in der unten stehenden Tabelle 19 dargestellt. Substanzen, welche bereits im Zigaretten-Ausschlusstest zu verzeichnen waren, sind auch hier wieder mit einem „x“ gekennzeichnet. Detektierte Kaffeearomastoffe, welche in der Liste nach *Nijssen et al.* (1996) aufschienen, wurden in der Tabelle wiederum mit „Fettbuchstaben“ erkennbar gemacht.

Wie bereits voran erwähnt wurde, konnten in der Café-Konditorei *Aida* weitaus mehr Substanzen erfasst werden, was das Chromatogramm mit seinem „Wald“ an Peaks sehr gut illustriert. Dessen ungeachtet konnten viele

Substanzen detektiert werden, welche bereits im *Kleinen Café* und/oder *Café Ritter* nachgewiesen wurden. Jene sind in der nachfolgenden Tabelle mit den Buchstaben „<sup>k</sup>“ für *Kleines Café* oder „<sup>r</sup>“ für *Café Ritter* markiert. Es gilt in den jeweiligen Abschnitten (vergleiche Abschnitt 4.2.3.2 und 4.2.4.2) nachzulesen.

*Tabelle 19 Substanzen der achttündigen Raumlufthmessung der Café-Konditorei Aida mittels HS-SPME-GC-MS*

Nr.	R <sub>t</sub> (min)	Substanz*	Synonym	Zig.
1	3,81	<b>Isoamylalkohol</b>	3-Methylbutanol	
2	4,40	<b>1,3-Pentadien</b> <sup>k</sup>	Piperylen	x
3	4,80	Thioharnstoff	Thiourea, Thiocarbamid	
4	5,20	<b>Amylalkohol</b>	1-Pentanol	
5	5,40	<b>Methylformiat</b>		
6	5,63	<b>2- und 3-Methylfuran</b>		x
7	5,86	<b>Essigester</b> <sup>k</sup>	Ethylacetat	
8	7,20	<b>Benzol</b> <sup>k, r</sup>		x
9	7,97-8,14	<b>Propionsäure</b>		
10	8,27	Trichlorethen <sup>k</sup>	Trichlorethylen	
11	8,34-8,48	<b>2,5-Dimethylfuran</b>		x
12	9,29	<b>2-Vinylfuran</b>		
13	9,56	<b>3-Butenon</b>	Methylvinylketon	
14	9,82	<b>2-Methylpyrrol</b>		
15	10,16	<b>Pyridin</b> <sup>k</sup>	Azin, Azabenzol	x
16	10,94	<b>Toluol</b> <sup>k, r</sup>	Methylbenzol	x
17	11,63	<b>Valeriansäure</b>	Pentansäure	
18	11,66	<b>Buttersäure</b>		
19	11,86	<b>2-Heptanon</b>	Methylamylketon	
20	12,50	<b>Hexanal</b>	Capronaldehyd	
21	12,74	Tetrachlorethen <sup>k</sup>	PER	
22	13,00	<b>4-Methylpentanon</b>		
23	13,57	<b>Methylpyridin</b> <sup>k</sup>	α- und β-Picolin	x
24	13,93	<b>2,5-Dimethylpyrazin</b>		
25	14,36	<b>Furfural</b> <sup>k</sup>	Furancarboxyaldehyd	x
26	15,29	<b>2-Furfurylalkohol</b> <sup>k</sup>	2-Furanmethanol	x
27	15,59	<b>Ethylbenzol</b> <sup>k, r</sup>	Phenylethan	x
28	16,08	<b>Xylol</b> <sup>k, r</sup>	Dimethylbenzol, o-, m- p-Xylol	x
29	17,40	<b>Styrol</b> <sup>k</sup>	Vinylbenzol, Ethenylbenzol	x
30	18,04	<b>Furfurylformiat</b>		
31	18,07	<b>Nikotinsäure</b>	Niacin	
32	18,45-18,47	<b>Acetylfuran</b>	2-Furylmethylketon	
33	18,62	<b>Methylpyrazin</b>		
34	18,80	<b>Ethylpyrazin</b>		
35	19,39	α-Pinen		
36	19,45	<b>Ethyloxazol</b>		
37	19,72	<b>2,3-Octandion</b>		
38	20,77	α-Silvestren		
39	21,08	<b>Ethyltoluol</b> <sup>r</sup>	<b>m-Ethyltoluol</b> ; auch o- und <b>p-</b>	x
40	21,15	<b>1,2,4-Trimethylbenzol</b> <sup>k</sup>	Pseudocumen	x
41	21,27	<b>1,3,5-Trimethylbenzol</b> <sup>k</sup>	Mesitylen	x
42	21,40	<b>5-Methylfurfural</b> <sup>k</sup>	5-Methylcarboxaldehyd	
43	21,61-21,68	<b>Benzaldehyd</b> <sup>k</sup>	Benzcarbaldehyd	x
44	22,17-22,25	<b>Phenol</b> <sup>k</sup>		x
45	22,76	<b>Decan</b> <sup>k</sup>		
46	22,85	<b>Furfurylacetat</b> <sup>k</sup>		
47	22,98	Cumol <sup>k</sup>	Isopropenylbenzol	x
48	23,62	Δ <sup>3</sup> -Caren		

Fortsetzung Tabelle 19

Nr.	R <sub>t</sub> (min)	Substanz*	Synonym	Zig.
49	23,77	$\alpha$ -Terpinen <sup>r</sup>	Mentha-1,3-dien	
50	23,91	4-Thujanol	Sabinenhydrat	
51	24,05	<b>1-Methyl-2-pyrrolcarbaldehyd</b>	2-Formyl-1-methylpyrrol	
52	24,11	Nikotinaldehyd <sup>k, r</sup>	Acetyloxim	x
53	24,31	<b>2-Pyrrolcarbaldehyd</b>	2-Formylpyrrol	
54	24,56	1,2,3-Trimethylbenzol <sup>k</sup>	Hemellitot	x
55	24,82	<b>(+)-Limonen</b> <sup>k</sup>	1,8-p-Menthadien	x
56	25,01	$\alpha$ -Phellandren		
57	26,37	$\beta$ -Phellandren		
58	26,61	<b>4-Ethyl-2-methylthiazol</b>		
59	26,99	Dihydromyrcenol <sup>r</sup>	2,6-Dihydro-7-Octen-2-ol	
60	27,37	p-Cymol <sup>k, r</sup>	p-Isopropyltoluol	
61	27,41	<b>Methylphenol</b> <sup>k</sup>	Kresol	x
62	27,96	Geranylisovalerat		
63	28,21	<b>Undecan</b>		
64	28,33	<b>p-Cyemenol</b> <sup>r</sup>	1-Isopropenyl-4-methylbenzol	
65	28,54	<b>(+/-)-Linalool</b> <sup>k</sup>	3,7-Dimethyl-1,6-octadien-3-ol	
66	28,88	Nonanal <sup>k</sup>	Pelargonaldehyd	
67	29,53	Hydroxyzimtalkohol		
68	29,76	<b>2-Phenylethanol</b> <sup>r</sup>	$\beta$ -Hydroxyethylbenzol, Rosenöl	
69	31,26	$\gamma$ -Undecalacton		
70	31,92	Menthon <sup>k, r</sup>	2-Isopropyl-5-methylcyclohexanon	
71	32,96	(-)-Menthol <sup>k, r</sup>	2-Isopropyl-5-methylcyclohexanol	
72	33,39	<b>Dodecan</b>		
73	33,83	<b>Naphthalin</b> <sup>k</sup>		
74	33,92	<b><math>\alpha</math>-Terpineol</b> <sup>k</sup>		
75	34,10	Decanal	Caprinaldehyd	
76	35,06	$\beta$ -Citronellol <sup>r</sup>	Rhodinol	
77	35,57	<b>5-Hydroxymethylfurfural</b> <sup>r</sup>	HMF	
78	35,88	trans-Zimtaldehyd	3-Phenyl-2-propenal	x
79	35,99	Bergamol <sup>r</sup>	Linalylacetat	
80	38,32	Isobornylacetat	Pichtosin	
81	39,30	<b>Indol</b> <sup>k</sup>	Benzopyrrol	x
82	40,08	<b>Methylnaphthalin</b> <sup>k</sup>	versch. Isomere	x
83	40,45	Triacetin <sup>k</sup>	1,2,3-Propantrioltriacetat	x
84	41,44	(S)-Nikotin	1-Methyl-2-(3-pyridinyl)-pyrrolidin	x
85	42,89	<b>Tetradecan</b> <sup>k</sup>		
86	44,34	(+)-Lonigfolen <sup>r</sup>	Kuromatsuen, Junipen	
87	44,48	Nopylacetat <sup>r</sup>	Essigsäurenopylester	
88	44,60	$\beta$ -Caryophyllen <sup>r</sup>	auch trans-	
89	44,61	(+)-Aromadendren		
90	45,76	Myosmin <sup>k, r</sup>	3-(3,4-Dihydroxy-2H-pyrrol-5-yl)pyridin	
91	46,70	$\alpha$ -Isomethylionon	$\alpha$ -Ceton	
92	47,24	<b>Pentadecan</b> <sup>k</sup>		x
93	47,67	Nikotyrin <sup>k, r</sup>	1-Methyl-2-(3-pyridyl)pyrrol	x
94	47,85	$\beta$ -Patchoulin		
95	51,08	<b>Hexadecan</b> <sup>k</sup>		
96	51,64	Phthalsäurediethylester <sup>k</sup>	Diethylester, Diethylphthalat	
97	53,63	$\beta$ -Methylionon <sup>k</sup>		

\* Übereinstimmung in NIST und WILEY: > 80%; <sup>k, r</sup> verweise auf Abschnitt 4.2.3.2; 4.2.4.2

Wie es im Chromatogramm des *Café Ritter* der Fall war, ist hier der Peak mit höchster Intensität ebenfalls **(+)-Limonen** (55) bei  $R_t$  24.82, welches auch in der Kaffeearomaliste nach *Nijssen et al.* (1996) verzeichnet ist [NIJSSEN et al., 1996]. Zwei weitere hohe Peaks – nahezu mit gleicher Intensität – stellen **2-Furfurylalkohol** (26), bei  $R_t$  15.29 und das Tabakalkaloid **Nikotin** (84) bei  $R_t$  41.44 dar. Furfurylalkohol konnte in allen, im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Analysen nachgewiesen werden.

Zu Beginn des Chromatogramms bei  $R_t$  3.81 wurden **Isoamylalkohol** (1) und später bei  $R_t$  5.20 **Amylalkohol** (4) aufgezeichnet. Beide aliphatischen Alkohole sind Bestandteile des Kaffeearomas und kommen zudem in vielen anderen Lebensmitteln vor. Erwähnenswert sind an dieser Stelle Apfelsaft, koffeinhaltige Teesorten, auch in Honig konnten die Autoren *Nijssen et al.* (1996) nennenswerte Konzentrationen feststellen [NIJSSEN et al., 1996]. Amylalkohol wurde zudem als Komponente von Körperausdünstungen in Innenraumluf-Messungen mit beachtlichen Konzentrationen nachgewiesen [PLUSCHKE, 1996]. Bei  $R_t$  4.80 konnte eine weitere, vorher noch nie nachgewiesene Verbindung detektiert werden, nämlich **Thioharnstoff** (3) oder Thiocarbamid, bei welcher es sich um eine Schwefelverbindung handelt, die man häufig als Zusatz zu Poliermitteln verwendet. Zudem wird es auch als Silberputzmittel und als herkömmliches Reinigungsmittel eingesetzt [HULPKE et al., 1996]. Da die SPME-Faser auf einem Wandregal positioniert war, ist es durchaus vorstellbar, dass es vom Polier- bzw. Reinigungsmittel stammt, mit dem das Regal gesäubert wurde. Bei 5.40 bzw. 5.63 Minuten kam es zum Nachweis von **Methylformiat** (5) und **Methylfuran** (6), welche sich nach *Nijssen et al.* (1996) als Kaffeearomastoffe erwiesen. Methylfuran wurde in Weißgebäck – beispielsweise in Butterbrioche oder Plundergebäck – als Aromastoff nachgewiesen. Diese Verbindung könnte auf das reichhaltige Mehlspeisen-Angebot zurückzuführen sein, da die Messfaser unweit vom Kuchenbuffet positioniert war. Außerdem ist es als natürliche Aromakomponente in Milch enthalten und könnte somit auch als mögliche Quelle infrage kommen, da die Milch bei der Espressomaschine für die Kaffeespezialitäten regelmäßig aufgeschäumt wurde [NIJSSEN et al., 1996].

Methylfuran fand man übrigens in allen getätigten Analysen, auch im Zigarettenrauch. Bei  $R_t$  7.97-8.14 wurde **Propionsäure** (9) detektiert. Diese ranzig riechende aliphatische Säure konnte schon im *Robusta*- und *Sidamo*-Kaffeegetränk nachgewiesen werden, denn trotz des unangenehmen Geruchsprofils gilt Propionsäure als Kaffeearomastoff. Aufgrund ihrer antimikrobiellen Wirkung wird diese  $C_3$ -Säure als Konservierungsmittel gegen Schimmel eingesetzt [HULPKE et al., 1996; ROTH und KORMANN, 1997]. Es konnten weitere aliphatische Säuren in der Raumluft der *Aida*-Filiale nachgewiesen werden. Bei  $R_t$  11.63 bzw.  $R_t$  11.66 kamen **Valeriansäure** (17) und **Buttersäure** (18) zum Nachweis, welche bereits im *Robusta*-Rohkaffee und Getränk bzw. zweitens auch im *Sidamo* nachgewiesen wurden. Zudem gibt es für Buttersäure noch weitere, für Innenräume nennenswerte Ursprungsquellen; sie ist eine der vorherrschenden Verbindungen von Körperausdünstungen. Somit ist es möglich, dass der Buttersäure-Peak durch Schweißsekretion intensiviert wurde [PLUSCHKE, 1996]. Überdies zählt Buttersäure, neben weiteren Substanzen, zu den Schlüsselaromastoffen von schwarzem Pfeffer, welchen man zum Würzen der angebotenen belegten Brote verwendete. Weitere potentielle Quellen für diese drei aliphatischen Säuren, welche an dieser Stelle nennenswert sind, sind Milch und Milchprodukte. Außerdem konnten diese Alkansäuren in Süßspeisen aus Weizenmehl, beispielsweise Butterkipferl oder Croissants, von den Autoren *Nijssen et al.* (1996) erfasst werden und kommen somit auch als Quelle infrage [NIJSEN et al., 1996; BELITZ et al., 2008]. Bei  $R_t$  8.34-8.48 bzw.  $R_t$  9.29 konnten wiederum zwei Kaffeearomastoffe nachgewiesen werden, nämlich **2,5-Dimethylfuran** (11) und **2-Vinylfuran** (12). Dimethylfuran konnte in beiden voran stehenden Wiener Kaffeehäuser detektiert werden und lässt sich auch auf den Zigarettenrauch zurückführen, da es in jenem Chromatogramm auch zum Nachweis kam. Außerdem kommt Dimethylfuran in nennenswerten Konzentrationen in Milch und Butter sowie in Orangensaft und Schwarztee vor. Eine weitere bedeutende Quelle stellt wiederum diverses Weißgebäck dar, welches in der *Aida*-Filiale in großer Auswahl angeboten wird [NIJSEN et al., 1996]. Bei  $R_t$  9.56 und  $R_t$  11.86 tauchten die Ketone **3-Butenon** (13) und das



würzig riechende **2-Heptanon** (19) auf, beide sind Aromakomponenten des Röstkaffees, wobei Heptanon in vielen Lebensmitteln enthalten ist. Beispielsweise kommt es in Milch und Milchprodukte – Butter, Käse und Joghurt – vor. Weitere relevante Quellen können Schwarztee, Kakao und Backwaren aus Weizenmehl sein. Bei  $R_t$  9.82 konnte eine basische Kaffeearomaverbindung, **2-Methylpyrrol** (14), nachgewiesen werden. Diese Pyrrol-Verbindung konnte von den Autoren *Nijssen et al.* (1996) wiederum in diversen Mehlspeisen aus Weizenmehl nachgewiesen werden. Da die SPME-Faser nicht weit vom Kuchenbuffet entfernt war, könnte dieser Peak möglicherweise das Resultat des vielfältigen Süßspeisen-Angebot sein [NIJSSSEN et al., 1996]. **Hexanal** (20), als Aromakomponente des Kaffees, kam bei  $R_t$  12.50 zum Vorschein. Dieser im Geruchsprofil als fettig-grün beschriebene  $C_6$ -Aldehyd konnte bereits im Rohkaffee und im Kaffeegetränk *Madagascar* sowie *Sidamo* aufgezeichnet werden. Hexanal kommt in bedeutend hohen Konzentrationen in Apfel- und Orangensaft sowie in Schwarztee, auch in geringeren Gehalten in Milch und Milchprodukten vor. Zudem ist es auch in Weizenmehlgebäck – beispielsweise in Brioche – nachgewiesen worden und könnte somit auch von dieser Quelle herrühren. Des Weiteren wird Hexanal auch gerne in Parfüms mit Frucht-Noten eingesetzt [NIJSSSEN et al., 1996; BAUER et al., 1997]. Bei einer Laufzeit von genau 13.00 Minuten wurde **4-Methylpentanon** (22) aufgezeichnet. Dieses Keton gilt als Kaffeearomastoff und wurde in den bisher besprochenen Untersuchungen noch nicht aufgezeichnet. Methylpentanon kommt in vielen Lebensmitteln vor, beispielsweise in Milch und Orangensaft oder Schwarztee. In der Aromaliste nach *Nijssen et al.* (1996) wird es auch im Gebäck, welches aus Weizenmehl hergestellt wurde, angeführt und könnte somit auch dieser Quelle zugeschrieben werden. Weitere basische Kaffeearomasubstanzen, **2,5-Dimethylpyrazin** (24), **Methylpyrazin** (33) und **Ethylpyrazin** (34) konnte im Chromatogramm bei  $R_t$  13.93,  $R_t$  18.62 und  $R_t$  18.80 nachgewiesen werden. Diese drei Pyrazin-Verbindungen wurden in keinem anderen Wiener Kaffeehaus gefunden. Außerdem konnten diese basischen Aromakomponenten in diversen Mehlspeisen, Kakao und koffeinhaltigen Tees nachgewiesen

werden. Alle genannten Ursprungsquellen kommen für die *Aida*-Filiale in Frage, da das Kuchenbuffet gleich neben der Messfaser angerichtet war und die Heißgetränke neben der Espressomaschine zubereitet wurden. **Furfurylformiat** (30), als weiteren noch nie detektierten Kaffeearomastoff und **Acetylfuran** (32), welches im *Kleinen Café* und im *Café Ritter* nachgewiesen wurde, konnten hier im Chromatogramm bei  $R_t$  18.04 bzw.  $R_t$  18.45 detektiert werden. Furfurylformiat konnte wiederum in verschiedenen Weißgebäcken als Aromakomponente nachgewiesen werden und könnte auf das reichhaltige Mehlspeisenangebot zurückzuführen sein [NIJSSEN et al., 1996]. Zwischen den beiden Furan-Verbindungen konnte **Nikotinsäure** (31) bei einer Analysezeit von 18.07 Minuten nachgewiesen werden. Nikotinsäure, ein Pyridinderivat mit einer Carboxylgruppe substituiert, steht unter anderem für das Vitamin Niacin. Es ist vor allem in pflanzlichen Nahrungsmitteln, wie Getreideprodukte, Milch, Tee – aber auch in Kaffee – in bedeutsamen Konzentrationen anzutreffen [ELMADFA und LEITZMANN, 2004].  **$\alpha$ -Pinen** ( $R_t$  19.39; 35), ein cyclischer Terpenkohlenwasserstoff, ist Bestandteil vieler ätherischer Öle. Es konnte von den Autoren *Nijssen et al.* (1996) in einigen Lebensmitteln, welche auch für diese Kaffeehaus-Untersuchungen relevant sind, nachgewiesen werden. Erwähnenswert sind hier Schwarztee, Orangensaft und vor allem Vanilleschote, welche zum Verfeinern einiger Mehlspeisen und Cremen – insbesondere in der Café-Konditorei *Aida* – verwendet wird. Weiters ist  $\alpha$ -Pinen Hauptbestandteil des Terpentinöls, welches als Reinigungsmittel Verwendung findet. Außerdem zählt es zu den Inhaltsstoffen des Eukalyptus- und Kiefernadelöls, welche gerne für Raumdüfte eingesetzt werden [NIJSSEN et al., 1996; ROTH und KORMANN, 1997].  $\alpha$ -Pinen konnte in keinem anderen Kaffeehaus detektiert werden. Im Chromatogramm – bei  $R_t$  19.45 und  $R_t$  19.72 – kamen die zwei Kaffeearomastoffe **Ethyloxazol** (36) und **2,3-Octandion** (37) zum Vorschein. Beide Verbindungen konnten bislang noch nicht nachgewiesen werden. Wobei Octandion in höheren Konzentrationen in Schwarztee vorkommt und somit als potentielle Quelle angesehen werden kann [NIJSSEN et al., 1996].

Ein schwacher Peak bei  $R_t$  20.77 steht für  **$\alpha$ -Silvestren** (38). Diese Verbindung kommt auch im Kiefernadelöl vor, welches gerne als Zimmerparfüm verwendet wird. Des Weiteren zählt es zu den Ingredienzien des Zypressenöls, dessen holzartiger Geruch mit Ambra-Note in der Parfümerie verwendet wird [ROTH und KORMANN, 1997]. Das im Rahmen dieser Untersuchungen noch nie aufgefundene  **$\Delta^3$ -Caren** (48), welches Bestandteil vieler ätherischer Öle ist, kam bei  $R_t$  23.62 zum Nachweis. Unter anderem findet es sich im Baldrian-, Zypressen- und Angelicawurzelöl, welche vielfältige Anwendung in der Parfümerie finden. Diesbezüglich könnte ein Kaffeehaus-Besucher, welcher ein Parfüm mit diesem Duftstoff trug, den Peak „verursacht“ haben.  $\Delta^3$ -Caren ist in vielen Lebensmitteln als Aromakomponente nachgewiesen worden. Erwähnenswert sind hier die Getränke Orangensaft und Schwarztee, sowie Butter und Pfeffer. Diese möglichen Quellen können den  $\Delta^3$ -Caren-Peak ausmachen bzw. diesen verstärken. Des Weiteren ist dieses Terpen Bestandteil des bereits mehrfach erwähnten Terpentinöls, das als Reinigungsmittel verwendet wird [NIJSSEN et al., 1996; ROTH und KORMANN, 1997]. **4-Thujanol** (50), das bei  $R_t$  23.91 aufgezeichnet wurde, ist Bestandteil des Majoranöls. Zudem ist 4-Thujanol Komponente des würzigen Thymianöls, welches wegen des charakteristischen Geruchprofils gerne in der Parfümerie verwendet wird. Thujanol ist in vielen Gewürzen – zum Beispiel in Dill, Rosmarin und Pfeffer – enthalten, welche folglich auch als relevante Quellen gelten [NIJSSEN et al., 1996; ROTH und KORMANN, 1997]. Im Chromatogramm bei  $R_t$  24.05 bzw.  $R_t$  24.31 konnten die Kaffeearomastoffe, **1-Methyl-2-pyrrolcarbaldehyd** (51) und **2-Pyrrolcarbaldehyd** (53), nachgewiesen werden. Beide mit sehr geringer Intensität. Diese beiden basischen Verbindungen kommen natürlicherweise in vielen Lebensmitteln vor. Erwähnenswert sind hier wiederum die aus Weizenmehl hergestellten Mehlspeisen [NIJSSEN et al., 1996]. Bei einer Laufzeit von 25.01 Minuten bzw. 26.37 Minuten konnten  **$\alpha$ -** und  **$\beta$ -Phellandren** (56 und 57) aufgezeichnet werden. Beide Isomere – mit Citrusgeruch und leichter Pfeffernote – kommen in vielen ätherischen Ölen vor. Sie sind Bestandteile des Pfeffers bzw. des Pfefferöls, welches in Parfümkompositionen, vor allem in Herrendüften

verwendet wird. Des Weiteren sind  $\alpha$ - und  $\beta$ -Phellandren Bestandteile des Eukalyptusöl, welches ebenso in der Parfümerie, vor allem für Raumdüfte, Einsatz findet. Außerdem sind beide isomere Formen in bedeutsamen Konzentrationen in Orangensaft, Schwarztee und Bourbon Vanille enthalten. Es ist durchaus möglich, dass diese Phellandren-Quellen infrage kommen, da jene Getränke häufig bestellt wurden und Vanille in Form von Vanillezucker gerne zum Bestreuen und Verfeinern für diverse Mehlspeisen verwendet wurde [NIJSSEN et al., 1996; ROTH und KORMANN, 1997; MARTINETZ und HARTWIG, 1998]. Ein kleiner Peak, bei  $R_t$  26.61 stellt **4-Ethyl-2-methylthiazol** (58) dar. Diese Schwefelverbindung kommt natürlicherweise im Kaffee vor [NIJSSEN et al., 1996]. **Geranylisovalerat** (62) konnte hier im Chromatogramm bei einer Retentionszeit von 27.96 Minuten erfasst werden. Als Reinsubstanz weist es einen stark fruchtigen und rosenartigen Geruch auf und wird folgedessen gerne in Parfüms und Duftkompositionen verwendet [BAUER et al., 1997]. Eine weitere, in der Liste von *Nijssen et al.* (1996) angeführte Kaffeearomasubstanz, das **Undecan** (63) konnte bei  $R_t$  28.21 mit schwacher Intensität aufgezeichnet werden. Zusätzlich konnte dieser Kohlenwasserstoff als Aromakomponente in Kakao, Milch und koffeinhaltige Teesorten erfasst werden. Auch in Honig und in der Vanilleschoten wurde Undecan in höheren Konzentrationen nachgewiesen [NIJSSEN et al., 1996]. Zwei Zimtverbindungen, **Hydroxyzimtalkohol** (67) und **trans-Zimtaldehyd** (78), konnten im Chromatogramm bei  $R_t$  29.53 bzw.  $R_t$  35.88 nachgewiesen werden. Zimtaldehyd findet in vielen Kompositionen zur Kreierung würziger und orientalischer Noten Einsatz, beispielsweise in Seifenparfüms und Deodorants [MARTINETZ und HARTWIG, 1998]. Zusätzlich kommen beide Verbindungen in nennenswerten Konzentrationen in Bourbon Vanille vor. Da Vanille in vielen Mehlspeisen in Form von Vanillezucker oder Vanillecreme enthalten ist oder auch in der *Aida* als Vanillesoße für den berühmten „Wiener Apfelstrudel“ angeboten wird, ist es möglich, dass diese Quellen für die Peaks der Zimtverbindungen infrage kommen [NIJSSEN et al., 1996]. Des Weiteren konnte Zimtaldehyd im Zigarettenrauch-Test, im *Kleinen Café* und *Café Ritter* nachgewiesen werden.

**$\gamma$ -Undecalacton** (69) auch Pfirsichaldehyd genannt, welcher in noch keinem der voran stehenden Chromatogrammen detektiert wurde, konnte hier bei  $R_t$  31.26 aufgezeichnet werden. Dieser  $C_{14}$ -Aldehyd weist einen pfirsichartigen Geruch auf und hat viele Anwendungen in Parfüms und Aroma-Kompositionen. Überdies wird er als Aromastoff für Getränke, Süßspeisen, Backwaren verwendet und kommt natürlicherweise in Butter vor. Es ist somit möglich, dass dieser Peak durch das unmittelbar neben der SPME-Faser angerichtete Süßspeisenbuffet zustande kam. Zudem sorgt Undecalacton als Additiv in Tabakwaren für süße und fruchtige Noten [NIJSSEN et al., 1996; MARTINETZ und HARTWIG, 1998; MERCKEL und PRAGST, 2005]. Ein deutlicher Peak, bei 33.19 Minuten zeigt **Dodecan** (72), welches als Kaffeearomastoff beschrieben wird und zudem in nennenswerten Konzentrationen in Kakao, Butter sowie Orangensaft und Grüntee nachgewiesen werden konnte. Außerdem finden sich beachtliche Mengen in Weißbrot und –gebäck und könnte somit wiederum auf das Mehlspeisenbuffet, welches direkt neben der Messfaser positioniert war, zurückzuführen sein [NIJSSEN et al., 1996]. Im Chromatogramm bei  $R_t$  34.10 kam es zur Detektion von **Decanal** (75) oder Caprinaldehyd. Dieser  $C_{10}$ -Aldehyd, wird in der Literatur mit einem blumigen und würzigen orangenartigen Geruch beschrieben. Als Komponente vieler ätherischer Öle kommt Caprinaldehyd zum Beispiel im Neroliöl und in verschiedenen Schalenölen – bedeutend im Orangenschalenöl – in hohen Konzentrationen vor. Dieser Kohlenwasserstoff ist in vielen Lebensmitteln enthalten. Erwähnenswert sind an dieser Stelle Kakao, Butter, Orangensaft und Grüntee, auch im Weißgebäck – beispielsweise Briochekipferl – konnte Decanal nachgewiesen werden. Alle diese Decanal-Quellen sind in der *Aida*-Filiale möglich und gelten als potentielle Quellen [NIJSSEN et al., 1996; BAUER et al., 1997]. **Isobornylacetat** (80) oder auch Pichtosin, welches bereits im Rohkaffee zum Nachweis kam, konnte auch in der Raumluft der *Aida*-Filiale bei  $R_t$  38.32 aufgefunden werden. Dieser cyclische Terpenester, mit angenehmen Fichtennadelgeruch ist Bestandteil vieler ätherischer Öle, welche häufig als Lufterfrischer oder zur Parfümierung von Seifen eingesetzt werden.

Außerdem konnte es in vielen Gewürze, beispielsweise in Rosmarin, identifiziert werden [NIJSSEN et al., 1996; BAUER et al., 1997].

Eine bislang noch nicht aufgefundene Substanz, **(+)-Aromadendren** (89), konnte im Chromatogramm der *Aida*-Filiale bei einer Retentionszeit von 44.61 Minuten aufgezeichnet werden. Diese tricyclische Verbindung kommt vor allem in Eukalyptus-Arten – vorwiegend im Öl – vor. Das Eukalyptusöl wird in der Lebensmittelindustrie zur Aromatisierung von Zuckerwaren und als Raumparfüm verwendet. Des Weiteren gilt Aromadendren als Aromastoff in Bier und ist auf Hopfen zurückzuführen. Außerdem wird es im pharmazeutischen Bereich zur Herstellung von Mundwässern verwendet, und ist Mittel gegen Schnupfen, Bronchitis und Grippe [NIJSSEN et al., 1996; ROTH und KORMANN, 1997]. Bei  $R_t$  46.70 konnte  **$\alpha$ -Isomethylionon** (91) detektiert werden. Ionone weisen einen veilchenähnlichen Geruch auf und werden aufgrund dessen in der Parfümerie – meist für Blumen- und Phantasie-Kompositionen eingesetzt [BAUER et al., 1997]. Diese Verbindung – hier im Chromatogramm mit ausgeprägtem Peak – könnte von einem Kaffeehaus-Gast stammen, welcher ein Parfüm, das die Komponente enthält, getragen hat.  **$\beta$ -Patchoulin** (94) wurde vormals noch nie aufgezeichnet und konnte hier im Chromatogramm bei  $R_t$  47.85 detektiert werden.  $\beta$ -Patchoulin ist Bestandteil von ätherischen Ölen, vorwiegend in Guajakholzöl, welches in Seifenparfüms, vor allem für Blumen-Noten verwendet wird [ROTH und KORMANN, 1997].

Stellt man die achtstündigen Messungen der Innenraumluft des *Kleinen Cafés*, des *Café Ritter* sowie der Café-Konditorei *Aida* gegenüber, so findet man Parallelen zueinander. In allen Kaffeehäusern spielen Tabakbestandteile – eine mehr oder weniger – große Rolle, da der Zigarettenrauch in allen Cafés nicht zu „überriechen“ war.

Die Analyse zeigt in allen Kaffeehäusern Tabak-Bestandteile wie Nikotin, Triacetin, Myosmin, Nikotyrin und Nikotinaldehyd sowie Zimtaldehyd, Menthon und Menthol – mit mehr oder weniger ausgeprägter Intensität – wobei die drei letzteren auch viele andere Quellen vorzuweisen haben.

Außerdem konnten einige Verbindungen nachgewiesen werden, welche in der Umwelt ubiquitär vorkommen. Hier zu nennen sind die BTX-Aromaten, welche in allen Kaffeehäusern aufgezeichnet wurden. Auch andere Aromaten, wie Styrol oder die Naphthaline sowie die Trimethylbenzole und Ethylbenzol konnten in allen Kaffeehäusern nachgewiesen werden. Diese aromatischen Verbindungen sind zugleich auch als Kaffeearomastoffe charakterisiert.

In allen Kaffeehäusern konnten etliche Verbindungen nachgewiesen werden, die in der Liste nach *Nijssen et al.* (1996) als Kaffeeröstaromastoffe verzeichnet sind. Hier zu erwähnen sind die in allen Kaffeehäusern aufgezeichneten Kohlenwasserstoffe: Tetra-, Penta- und Hexadecan sowie Decan und auch Piperylen. Des Weiteren kam es immer wieder zur Detektion einer Reihe basischer Kaffeearomastoffe. Erwähnenswert sind hier Limonen sowie Pyrrol und Pyridin, als auch Indol und die Picoline. Zudem konnten auch viele zur Gruppe der Alkohole zählenden Verbindungen – wie  $\alpha$ -Terpineol und Linalool – in allen Kaffeehäusern aufgezeigt werden. Ebenfalls wurden die phenolischen Kresole in allen Cafés nachgewiesen. Auch der bittermandelartig riechende Benzaldehyd erwies sich als Bestandteil der Innenraumluft dieser Wiener Kaffeehäuser. Das Weiter ist die Substanzgruppe der Furane vielfach in den Innenräumen der Wiener Kaffeehäuser vertreten. Unter anderem konnten Acetyl-, Methyl- und Dimethylfuran sowie Methylfurfural und Furfurylalkohol in allen Kaffeehaus-Analysen nachgewiesen werden.

Manche Kaffeearomastoffe sind natürlicherweise in viel zu geringen Konzentrationen vorhanden, um sie in der Innenraumluft der Kaffeehäuser nachweisen zu können. Es ist auch schwierig ein optimales „Screening-Verfahren“ zu entwickeln, da sich sowohl die Raumluft als auch das Kaffeearoma aus vielen Einzelkomponenten zusammensetzt, die sich von ihren chemischen Eigenschaften stark unterscheiden.

Außerdem gilt zu erwähnen, dass viele dieser detektierten Kaffeeröststoffe andere bzw. zusätzliche Ursprungsquellen aufzeigen. Somit kann nicht geklärt werden, ob diese Kaffeearomastoffe tatsächlich dem Kaffee zuzuschreiben sind.

Es wurden in allen Kaffeehäusern einige Substanzen aufgezeichnet, die sich unter anderem auch auf Parfümkomponenten zurückführen lassen.

Die unten angeführte Tabelle 20 soll Aufschluss über nachgewiesene Kaffeehaus-Substanzen geben, welche mehrheitlich in allen Wiener Kaffeehaus-Institutionen zur Detektion kamen. Des Weiteren werden sie der Zigarettenrauch-Auswertung sowie den Analysen des Kaffees – Rohkaffee und Getränke – zur vergleichenden Analyse gegenübergestellt. Es ist zu erkennen, dass einige Substanzen bereits mehrfach in den Kaffee-Analysen zum Nachweis kamen. Erwähnenswert sind die Furan-Verbindungen – Furfurylalkohol und Furfural konnten in allen Untersuchungen – auch im Zigarettenrauch – nachgewiesen werden. Methyl-, Dimethyl- und Acetylfuran sowie Furfurylacetat wurden in den Kaffeegetränken sowie im Tabakrauch nachgewiesen. Methylfurfural konnte in allen getätigten Kaffee-Analysen sowie in allen Kaffeehäusern aufgezeichnet werden. Des Weiteren wurden auch einige basische Verbindungen in der Innenraumlufte der Kaffeehäuser aufgezeichnet, die man vielfach in den Kaffeeanalysen nachwies. Pyridin konnte in allen getätigten Untersuchungen zum Nachweis gebracht werden. Methyl- und Dimethylpyrazin, welche vereinzelt in den Kaffeehäusern erschienen, sind bereits in der Analyse der Kaffeegetränke mehrfach aufgezeichnet. Zudem konnte Acetylpyrrol auch im *Sidamo*-Getränk detektiert werden. Auch die Butter-, Propion- und Valeriansäure, welche in der *Aida*-Filiale nachgewiesen wurden, konnten in den Kaffeeanalysen bereits mehrfach detektiert werden. Die in der Tabelle „fett“ markierten Substanzen, sind jene die in der Liste nach *Nijssen et al.* (1996) als Kaffeearomastoffe aufscheinen.



**Tabelle 20** Vergleichende Darstellung ausgewählter Kaffeehaus-Substanzen mit Rohkaffee, Kaffeegetränke und Zigarettenrauch

Substanz	KLEINES	RITTER	AIDA	Zig.	ROH	MADAG.	SANTOS	SIDAMO
<b>2-/3-Methylfuran</b>	x	x	x	x		x	x	x
<b>2,5-Dimethylfuran</b>	x	x	x	x				
<b>2,5-Dimethylpyrazin</b>			x			x	x	x
<b>2-Acetylpyrrol</b>		x						x
<b>2-Furfurylalkohol</b>	x	x	x	x	x	x	x	x
<b>2-Phenylethanol</b>		x	x					
<b>5-Hydroxy-methylfurfural</b>		x	x					
<b>5-Methylfurfural</b>	x	x	x		x	x	x	x
<b>Acetylfuran</b>	x	x	x			x	x	x
<b>Benzaldehyd</b>	x	x	x	x	x	x		
<b>Benzol</b>	x	x	x	x				
Bergamol		x	x					
<b>Buttersäure</b>			x		x	x		x
Cumol	x		x	x				
<b>Cymenol</b>		x	x					
Cymol	x	x	x					
<b>Decan</b>	x	x	x					
<b>Dimethylnaphthalin</b>	x	x		x				
<b>Essigester</b>	x		x					
<b>Ethylbenzol</b>	x	x	x	x				
<b>Ethylpyrazin</b>			x					x
<b>Ethyltoluol</b>		x	x	x				
<b>Furfural</b>	x	x	x	x	x	x	x	x
<b>Furfurylacetat</b>	x		x			x	x	x
Hemellitol	x	x	x	x				
<b>Hexadecan</b>	x	x	x					
<b>Indol</b>	x	x	x	x				x
<b>Limonen</b>	x	x	x	x	x			
<b>Linalool</b>	x	x	x		x			
Longifolen		x	x					
Menthol	x	x	x					
Menthon	x	x	x					

Fortsetzung Tabelle 20

<b>Substanz</b>	<i>KLEINES</i>	<i>RITTER</i>	<i>AIDA</i>	<i>Zig.</i>	<i>ROH</i>	<i>MADAG.</i>	<i>SANTOS</i>	<i>SIDAMO</i>
<b>Mesitylen</b>	x	x	x	x				
<b>Methylnaphthalin</b>	x	x	x	x				
<b>Methylphenol</b>	x	x	x	x		x		
<b>Methylpyrazin</b>			x				x	x
Myosmin	x	x	x					
Myrtenal	x	x		x				
<b>Naphthalin</b>	x	x	x					
Nikotin	x	x	x	x				
Nikotinaldehyd	x	x	x	x				
Nikotyrin	x	x	x	x				
Nopylacetat		x	x					
Pelargonaldehyd	x	x	x		x			
<b>Pentadecan</b>	x	x	x	x				
<b>Phenol</b>	x	x	x	x				
<b>Piperylen</b>	x	x	x	x				
<b>Propionsäure</b>			x			x		x
<b>Pseudocumen</b>	x	x	x	x				
<b>Pyridin</b>	x	x	x	x	x	x	x	x
<b>Pyrrol</b>	x		x	x				
<b>Styrol</b>	x	x	x	x				
Tetrachlorethen	x		x					
<b>Tetradecan</b>	x	x	x					
<b>Toluol</b>	x	x	x	x	x	x		
Triacetin	x	x	x	x				
Trichlorethen	x		x					
<b>Valeriansäure</b>			x		x	x		
<b>Xylol</b>	x	x	x	x				
Zimtaldehyd	x	x	x	x				
<b>α- und β-Picolin</b>	x	x	x	x				
<b>α-Terpineol</b>	x	x	x					
α-Terpinylacetat	x	x						
β-Caryophyllen		x	x					
β-Citronellol		x	x					

## KAPITEL V

### 5. SCHLUSSBETRACHTUNG

#### 5.1. Allgemeines zu den Düften Wiener Kaffeehäuser

Da die Wiener Kaffeehaus-Tradition nicht nur in Österreich – sondern auch weltweit – einen hohen Stellenwert besitzt – war es interessant zu wissen, wie es denn in solch einer Räumlichkeit riecht.

Das Ziel dieser Arbeit war es, den Duft in ausgewählten Klassischen Wiener Kaffeehaus-Institutionen mittels effizienter Analysemethode zu erfassen und möglichst viele Kaffeearomastoffe nachzuweisen. Im Rahmen dieser Untersuchungen wurde die HS-SPME-Methode in Kopplung mit GC-MS gewählt, welche im „Zusammenspiel“ als leistungsfähige und innovative Untersuchungsmethode – vor allem für Aromastoffanalysen – gilt.

Da die Raumluft und auch das Kaffeearoma aus vielen Einzelkomponenten – welche sich in ihren chemischen Eigenschaften deutlich voneinander unterscheiden – besteht, war es nicht so einfach – eine geeignete „Screening-Methode“ zu entwickeln. Aus diesem Grund mussten einige Versuche bzgl. Kaffeegetränk- und Kaffeehaus-Analysen im Vorfeld durchgeführt werden.

Um die Ergebnisse der Raumluft-Analysen der Kaffeehäuser *Aida*, *Kleines Café* und *Ritter* richtig interpretieren zu können, bedurfte es einiger Hilfestellungen.

Hierzu waren die Analysen der Kaffeegetränke *Robusta Madagaskar*, *Arabica Santos* (ungewaschen) und *Arabica Sidamo* (gewaschen) ausgesprochen nützlich. In diesen Untersuchungen konnten viele

Kaffeearomastoffe, der unterschiedlichsten Substanzgruppen erfasst und zur Interpretation der Kaffeehaus-Raumluft herangezogen werden.

Um den Zigarettenrauch – der in allen Kaffeehäuser olfaktorisch gut wahrzunehmen war – besser erläutern zu können, wurde eine Zigarettenrauch-Messung separat durchgeführt.

Zur weiteren Interpretation nutzte man bereits bestehende Arbeiten von *Merckel* und *Pragst* (2005, 2006 und 2007) sowie literarische Werke der Duft-, Aroma- und Riechstoffchemie. Des Weiteren wurde auch die Kaffeearomastoff-Liste nach *Nijssen et al.* (1996) – welche alle 835 bislang identifizierten Röstkaffeearomastoffe beinhaltet – herangezogen. Zusätzlich waren weitere Aromalisten dieser Autoren – für diverse Getränke und Speisen, welche in Kaffeehäusern gängig sind – sehr hilfreich für die Auswertung und Interpretation dieser Arbeit.

Jeder einzelne Peak wurde mit den Spektrenbibliotheken von WILEY und NIST ausgewertet. Alle Analysen, welche im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt wurden, erfolgten mit ein und derselben optimierten Analysemethode.

## **5.2. Charakteristische Substanzen der Innenraumluft des *Kleinen Cafés***

Betrachtet man das achtstündige Chromatogramm des *Kleinen Cafés*, so ist erkennbar, dass es sich von den anderen Chromatogrammen deutlich unterscheidet. Die Peaks sind eher dünn „besiedelt“ und die Intensitäten einzelner Peaks sind oftmals spärlich ausgeprägt. Bei der Analyse des „Acht-Stunden“-Chromatogramms wurde bestätigt, dass weitaus weniger Substanzen in der Raumluft des *Kleinen Cafés* „gesammelt“ und aufgezeigt wurden.

Des Weiteren liegen die Schwerpunkte zum Teil wo anderes, zum Beispiel hat im Chromatogramm des *Kleinen Cafés* die höchste Intensität – im Gegensatz zur *Aida* und *Café Ritter* – das Tetrachlorethen (PER). Diese zu den

LCKW zählende Substanz, weist gute Lösungsmittel-Eigenschaften für lipophile Substanzen auf und wird deshalb als Reinigungsmittel für Fette eingesetzt [HULPKE et al., 1996]. Die hohe Intensität ist vermutlich das Resultat des im Geschirrspüler verwendeten Reinigungsmittels. Da die SPME-Faser in der Nähe einer Geschirrspülmaschine stand, ist es durchaus denkbar, dass sich die Höhe des Peaks intensiviert hat, denn es konnte mit weitaus weniger Intensität auch in der Café-Konditorei *Aida* nachgewiesen werden.

Das Kaffeearoma war im *Kleinen Café* kaum wahrnehmbar, dennoch konnten nahezu 50 Kaffeearomasubstanzen detektiert werden, von denen 35 in der voran stehenden Tabelle 17 dargelegt sind. Diese Röstkaffee-Aromastoffe wurden großteils auch im *Café Ritter* und in der Café-Konditorei *Aida* nachgewiesen. Erwähnenswerte Kaffeearomastoffe sind hier Harnstoff und Maltol, welche in keinem anderen Kaffeehaus zum Nachweis kamen. Beide Verbindungen erscheinen im Chromatogramm mit äußerst geringer Intensität. Zudem kommt Harnstoff natürlicherweise in Tabak vor und ist Bestandteil des Zigarettenqualms, womit fraglich wird, welcher Quelle dieser Urea-Peak „entspringt“. Maltol konnte bereits im *Sidamo*-Kaffeegetränk nachgewiesen werden, zugleich könnte es auch von einem anderen Lebensmittel stammen, da es als Süßungsmittel eingesetzt wird [BELITZ et al., 2008].

Auffallend im *Kleinen Café* war der Geruch nach frischem Gemüse und aromatischen Kräutern, die in den ersten Messstunden für die „speziellen“ Gemüsebrote vorbereitet wurden. Dieser Wohlgeruch, welcher am Vormittag des Messtages olfaktorisch gut wahrnehmbar war, konnte im Chromatogramm des *Kleinen Cafés* erfasst werden. In dieser Kaffeehaus-Institution kamen einige Substanzen zum Nachweis, welche sich auf das Gemüse und die frischen Kräuter zurückführen lassen. Einzigartig in diesem „Acht-Stunden“-Chromatogramm sind (+)-Carvon und Allylisothiocyanat oder Senföl, welche in keinem anderen Kaffeehaus aufgefunden wurden. (+)-Carvon weist einen an Kümmel und Dillsamen erinnernden Geruch auf und zählt in dessen ätherischen Ölen zu den Schlüsselaromastoffen. (+)-Carvon, zählt neben Limonen, Terpeneol, Nonanal und p-Cymol, zu den Aromastoffen von Dillkraut, welches vormittags an der Anrichte lag [NIJSSEN et al., 1996; BELITZ et al.,

2008]. Allylisoithiocyanat, welches einen scharfen kohlartigen Geruch aufweist, ist Bestandteil vieler *Brassicaceae*-Arten – diesbezüglich gilt Weißkraut, Kohlrabi, Radieschen und Rettich sowie Kresse zu nennen. Senföl könnte möglicherweise auf die „Krautfleckerl“ zurückzuführen sein, welche zur Mittagszeit aufgetischt wurden. Andere Ursprungsquellen die den Senföl-Peak ausmachen bzw. verstärken kommen natürlich auch infrage. Erwähnenswert an dieser Stelle sind Würstel mit Senf, beispielsweise „Frankfurter“, welche im *Kleinen Café* gerne bestellt werden.

Ansonsten gilt zu erwähnen, dass der Nikotin-Peak in diesem Wiener Kaffeehaus vergleichsweise niedrig ausgefallen ist. Die Zugluft, welche das Resultat zweier Eingänge ist, sorgte wohl im *Kleinen Café* – als eine Art Klimaanlage – für eine gute Frischluftzufuhr. Tabaksubstanzen wie Triacetin, welches als Lösungsmittel eingesetzt wird und die Nebenalkaloide Myosmin und Nikotyrin wurden mit einer ausgesprochen geringen Intensität im Chromatogramm aufgezeichnet. Des Weiteren konnte hier Acrolein – vor allem ein flüchtiger Tabakduftstoff – wie auch das Tabakadditiv Borneol und das im Tabak natürlich enthaltene Solanon nicht nachgewiesen werden. Ebenso wenig konnte Nikotinnitril, welches im Zigarettenrauch-Test und im *Café Ritter* erschien, in der Innenraumluft des *Kleinen Cafés* gefunden werden.

Einzigartig in der Raumluft des *Kleinen Cafés* waren Substanzen wie 4-Hydroxybenzoesäure, welche in Beerenobst und Gewürzen eine Rolle spielt und zudem im Zigarettenrauch aufgefunden wurde. Einmalig im *Kleinen Café* war auch Santalol, das sich ebenso auf Gewürze wie Rosmarin und Pfeffer zurückführen lassen kann [NIJSSEN et al., 1996].

Überblickend kann man über die Raumluft des *Kleinen Cafés* sagen, dass einige Substanzen nachgewiesen wurden – welche auf das Kaffee Aroma zurückzuführen sind – zugleich aber auch von anderen oder zusätzlichen Quellen stammen können. Dasselbe gilt für Zigarettenrauch-Inhaltsstoffe. Hierbei konnten einige durch aktuelle Studien ausfindig gemacht bzw. durch den Zigarettenrauch-Ausschlusstest zugeordnet werden. Des Weiteren konnte der olfaktorisch wahrgenommene Geruch nach frischen Kräutern und Gemüse durch die Raumluft-Analyse bestätigt werden.

### 5.3. Charakteristische Substanzen der Innenraumluft des *Café Ritter*

Auch beim Vergleich des achtstündigen Chromatogramms des Vorstadtcafé *Ritter* zeigen sich wiederum deutliche Unterschiede. Vor allem die Gegenüberstellung des Chromatogramms mit jenem des *Kleinen Cafés* zeigt optisch starke Differenzen. Dennoch sind zwischen den achtstündigen Kaffeehaus-Analysen Parallelen zu finden. Beachtlich ist der Limonen-Peak, welcher nahezu in der Mitte des Chromatogramms liegt und die höchste Intensität, wie auch in der Café-Konditorei *Aida*, besitzt. Aufgrund der enormen Höhe des Peaks, muss der Kaffeearomastoff Limonen eine Vielzahl an Ursprungsquellen haben. Da es gerne als Geruchsverbesserer eingesetzt wird, kann es vom Tabak sowie vom Reinigungsmittel als auch von Lebensmitteln, stammen. Diesbezüglich erwähnenswert sind Getränke wie Orangen- und Apfelsaft, koffeinhaltige Teesorten, Wein und Bier. Auch in Speisen wie in Pommes frites, Eierspeise oder gebratenem Fleisch finden sich beachtliche Limonen-Konzentrationen [NIJSSEN et al., 1996]. Dieser Kohlenwasserstoff ist in vielen Lebensmitteln als natürlicher Aromastoff enthalten, was vermutlich auch die Mächtigkeit dieses Peaks erklären lässt.

Auch wenn im *Café Ritter* das angenehme Kaffeearoma zu keinem Zeitpunkt der Messdauer olfaktorisch wahrzunehmen war, konnten doch einige Komponenten des Kaffeearomas eingefangen und zum Nachweis gebracht werden. Es wurden etwa 55 Kaffeearomasubstanzen per HS-SPME „eingefangen“ und nachgewiesen, wobei 38 davon in der Tabelle 18 aufgelistet sind. Acrolein, welches einzigartig in der Raumluft des *Café Ritter* war, gilt – zumal es in der Liste nach *Nijssen et al.* (1996) auch als Kaffeearomastoff eingetragen ist – vor allem als Tabakadditiv. Zusätzlich konnten Kaffeearomasubstanzen wie Amylalkohol, p-Cymenol und Phenylethanol nachgewiesen werden, welche parallel zur *Aida* aufgezeichnet wurden. Natürlich ist es möglich, dass für diese Verbindungen andere bzw. mehrere Quellen infrage kommen bzw. den aufscheinenden Peak verstärken.

Auffallend in der „Acht-Stunden“-Messung des *Café Ritter* ist der außerordentlich hohe Nikotin-Peak, welcher das Resultat der in der Überzahl anwesenden Raucher-Gäste ist. Trotz der hohen Räumlichkeiten, war der Tabakrauch nicht nur olfaktorisch, sondern auch visuell äußerst deutlich wahrnehmbar. Zudem konnten viele Substanzen detektiert werden, die auf Tabakwaren zurückzuführen sind. Hierbei zu erwähnen sind Borneol, Cymenol oder Menthon und Menthol sowie Zimtaldehyd, welche als Geschmacksträger dem Tabak zugesetzt werden. Auch das bereits erwähnte Acrolein, das als Feuchthaltemittel dem Tabak zugesetzt wird und Solanon, welches natürlicherweise im Tabak vorkommt, konnten detektiert werden. Das Chromatogramm des *Café Ritter* spiegelt, man kann sagen, die verrauchte Atmosphäre in diesem Kaffeehaus sehr gut wieder.

Am Tag der Messung war das *Café Ritter* ab dem frühen Nachmittag sehr gut besucht, vor allem von der zum Spiel geneigten Männergesellschaft. Zur Mittagszeit wurden angebotene Speisen wie Zwiebelsuppe und Würstel mit Pommes oder Erdäpfelgulasch bestellt. So mancher Gast gönnte sich bereits zum Mittagessen ein Bier oder ein Glaserl Wein. Die Speisekarte im *Café Ritter* ist ausgesprochen reichhaltig und erklärt vermutlich, dass sehr viele Substanzen detektiert wurden, welche auf angebotene Getränke und Speisen zurückzuführen sind. An dieser Stelle sind (+)-Sabinen sowie  $\beta$ -Caryophyllen als auch Cymenol und  $\alpha$ -Cedren zu nennen, welche in vielen Lebensmitteln, u.a. in gebratenem Fleisch, Gewürzen – wie Pfeffer und Rosmarin – Orangensaft, Bier und koffeinhaltige Teesorten nachgewiesen werden konnten [NIJSSEN et al., 1996]. Des Weiteren wurden einige Bestandteile des Rosenöls aufgefunden, welches in Parfüms zu tragen kommt. Diesbezüglich sind auch Linalool, Phenylethanol, Zimtaldehyd, Bergamol wie auch Citronellol zu erwähnen. Zusätzlich kommt diesen Aromastoffen auch in vielen Lebensmitteln große Bedeutung zu. In nennenswerten Konzentrationen finden sich die voranstehenden Verbindungen in Milch und Kakao sowie Apfel- und Orangensaft, Bier, Wein als auch in Schwarztee. Alle diese Getränke sind relevante Quellen für die oben angeführten Verbindungen [NIJSSEN et al., 1996; ROTH und KORMANN, 1997; MARTINETZ und HARTWIG, 1998].



Außerdem sind zahlreiche Komponenten des Terpentins, welches als Reinigungsmittel eingesetzt wird, in der Raumluft-Analyse des *Café Ritter* anzutreffen. Erwähnenswert sind hier Borneol und Limonen sowie Cymol als auch Longifolen und  $\beta$ -Cadinen. Auch diese Aromastoffe sind zusätzlich in vielen Lebensmitteln enthalten, welche somit den jeweiligen Peak verstärken oder ausmachen. Borneol kommt beispielsweise in Kakao und Schwarztee vor. Cadinen wurde in Rosmarin, Pfeffer sowie in Grün- und Schwarztee identifiziert. Cymol konnte zusätzlich in Orangensaft, Honig und koffeinhaltigen Teesorten nachgewiesen werden [NIJSSEN et al., 1996].

Zusammenfassend kann man sagen, dass den Schwerpunkt in der Raumluft-Analyse des *Café Ritter* sicherlich Komponenten diverser angebotener Speisen und Getränke sowie Zigarettenrauch-Ingredienzien ausmachen. Natürlich konnten auch etliche Verbindungen des Kaffeearomas nachgewiesen werden, fraglich ist nur, ob diese auch vom Kaffee stammen, da der wohlriechende Kaffeeduft vom dominanten Zigarettenrauch „überdeckt“ wurde.

#### **5.4. Charakteristische Substanzen der Innenraumluft der Café-Konditorei *Aida***

Betrachtet man die Chromatogramme und vergleicht sie untereinander, so sieht man, dass jenes der achtstündigen *Aida*-Messung wesentlich dichter mit Peaks gedrängt ist. Bei der Auswertung des *Aida*-Chromatogramms wurde belegt, dass wesentlich mehr Substanzen aufgezeichnet wurden. Dennoch konnten auch in dieser Messung – verglichen mit den Analysen der beiden anderen Kaffeehäuser – Parallelen gefunden werden. Unter anderem ist auch Limonen der intensivste Peak im Chromatogramm; genau wie im *Café Ritter*.

Kaffeearomastoffe, welche im *Ritter* und im *Kleinen Café* detektiert wurden, schienen ebenfalls in der Raumluft der Café-Konditorei *Aida* auf und konnten zusätzlich durch weitere ergänzt werden. Das heißt

Röstkaffeearomastoffe – welche nach *Nijssen et al.* (1996) charakterisiert wurden – sind in der *Aida*-Raumluft anteilmäßig mehr aufgefunden worden.

Beim Eintritt in die *Aida*-Filiale wurde der wohlriechende Kaffeeduft olfaktorisch ausgesprochen gut wahrgenommen; dies wurde auch im Bewertungsbogen notiert. Das Chromatogramm bestätigt dies, denn es konnten insgesamt etwa 70 Kaffeearomastoffe, von denen 59 in der oben angeführten Tabelle aufgelistet sind, wieder gefunden werden.

In der *Aida*-Raumluft konnten zusätzlich einige als Kaffeearomastoffe charakterisierte Säuren aufgespürt werden, welche in den Untersuchungen der Kaffeegetränke bereits zum Nachweis kamen. Diesbezüglich zu erwähnen gilt Propion-, Butter- und Valeriansäure. Diese aliphatischen Säuren können jedoch auch von einer anderen potentiellen Quelle herrühren. Außerdem konnten einige in der Liste nach *Nijssen et al.* (1996) aufgelistete – als Basen bezeichnete – Kaffeearomastoffe zum Nachweis gebracht werden, welche im *Aida* einzigartig waren. Unter anderem sind hier Methylpyrrol sowohl Methyl-, Ethyl- und Dimethylpyrazin als auch Methylpyrrolcarbaldehyd und Pyrrolcarbaldehyd zu nennen. Darüber hinaus ist die Substanzgruppe der Ketone vielfach vertreten. Zusätzlich konnten im Chromatogramm der *Aida*-Filiale Butanon, Heptanon, Methylpentanon sowie Octandion verzeichnet werden, die in den vorher untersuchten Kaffeehäusern nicht aufgefunden wurden. Auch die Substanzklasse der Furane konnte im Chromatogramm einige Male nachgewiesen werden, hinzukommend Vinylfuran und Furfurylformiat, welche in der Liste nach *Nijssen et al.* (1996) eingetragen sind und bislang noch nie verzeichnet wurden. Außerdem konnte Hexanal – ein C<sub>6</sub>-Aldehyd – nur in der Café-Konditorei *Aida* aufgezeichnet werden. In den voran stehenden Untersuchungen der Kaffeevarietäten ist dieser Aldehyd im *Robusta Madagaskar* Rohkaffee und Getränk sowie im *Sidamo* Getränk aufgefunden worden. Des Weiteren konnten zusätzlich in der *Aida*-Raumluft Isoamylalkohol, Methylformiat, Ethyloxazol und die Schwefelverbindung Ethylmethylthiazol sowie der Kohlenwasserstoff Undecan, welche als Kaffeearomastoffe gelten, nachgewiesen werden. Auch hier könnten andere bzw. zusätzliche Quellen in Erwägung gezogen werden, welche den jeweiligen Peak ausmachen bzw.

verstärken. Einzigartig im Chromatogramm der *Aida*-„Acht-Stunden“-Messung ist die aufgefundene Nikotinsäure, welche viele Quellen – unter anderem Getreideprodukte, Milch, Tee und auch Kaffee – vorzuweisen hat.

Einmalig im Chromatogramm der Café-Konditorei *Aida* waren die vielen Aromastoffe, welche auf ätherische Öle zurückzuführen sind. Diesbezüglich zu erwähnen gilt  $\alpha$ -Silvestren,  $\alpha$ -Terpineol,  $\alpha$ - und  $\beta$ -Phellandren sowie (+)-Aromadendren als auch  $\alpha$ -Pinen. Diese Substanzen kommen auch in vielen Lebensmitteln vor und können somit auch diese als Ursprungsquelle haben. Zu erwähnen gilt: Bourbon Vanille, welche vielseitigen Einsatz in der Süßspeisenzubereitung findet. Des Weiteren konnte in der *Aida*-Filiale Isobornylacetat, das bereits im Rohkaffee zum Nachweis kam, detektiert werden. Dieser cyclische Terpenester ist ebenfalls Bestandteil von ätherischen Ölen, welche als Lufterfrischer Einsatz finden.

Außerdem wurden auch viele Duftstoffe aufgezeichnet, deren Quelle ein Parfüm sein könnte. Diesbezüglich konnten  $\Delta^3$ -Caren, 4-Thujanol, Geranylisovalerat und  $\beta$ -Patchoulin aufgezeichnet werden, welche in keinem der voran stehenden Wiener Kaffeehäuser nachgewiesen wurden. Natürlicherweise kommen diese Aromakomponenten auch in Rosmarin und Pfeffer vor [NIJSSEN et al., 1996].

Der Zigarettengeruch war auch in dieser Kaffee-Institution gut wahrnehmbar, vor allem im Eingangsbereich. Dennoch zeigte die Analyse des Chromatogramms der *Aida*-Filiale verhältnismäßig wenig Zigaretten-Inhaltsstoffe und -Additive. Zum Beispiel konnte kein Nachweis von Acrolein und Dimethylnaphthalin erbracht werden, welche im Tabakrauch vorkommen und zudem natürliche Komponenten des Kaffeearomas sind. Außerdem konnten das Tabakadditiv Borneol und Solanon – als natürlicher Tabakbestandteil – nicht nachgewiesen werden. Auch Myrtenal, welches im Zigarettenrauch-Ausschlusstest und in den beiden anderen Wiener Kaffeehäusern nachgewiesen wurde, konnte in der Innenraumluft der *Aida*-Filiale nicht gefunden werden. Andererseits zeigt das Chromatogramm der *Aida*-Raumluft-Messung zwei weitere – in den anderen Kaffeehäusern noch nie nachgewiesene – Tabak-Substanzen, nämlich Hydroxyzimtalkohol und  $\gamma$ -

Undecalacton oder auch Pfirsichaldehyd, welche als geschmacksgebende Komponenten Tabakwaren beigesetzt werden. Wobei zu erwähnen gilt, dass diese Verbindungen in der Bourbon Vanille enthalten sind. Folgedessen könnten diese Peaks vom Mehlspeisenbuffet – welches unmittelbar neben der Messfaser angerichtet war – stammen, da Vanille zum Verfeinern dieser Süßspeisen eingesetzt wird.

Zusammenfassend kann über die Innenraumluft der *Aida*-Filiale gesagt werden, dass die olfaktorische Wahrnehmung des Kaffeearomas teils durch die Raumluftanalyse wiedergegeben wurde, da verhältnismäßig viele Kaffeearomastoffe zum Nachweis kamen. Es gilt auch hier zu erwähnen, dass jeder Substanz-Peak mehrere Quellen aufzuweisen hat. Beispielsweise finden sich Kaffeearomastoffe teils auch als Tabaksubstanzen – sei es als natürlicher Inhaltsstoff oder als Additiv – wieder. Des Weiteren konnten einige Inhaltsstoffe – welche auf ätherische Öle zurückzuführen sind – nachgewiesen werden.

In der *Aida*-Raumluft konnten auch etliche Substanzen aufgezeichnet werden, welche sich auf die *Aida*-Süßspeisen aus Weizenmehl zurückführen lassen bzw. deren Ursprung die Bourbon Vanille sein könnte, welche vielseitige Verwendung in Mehlspeisen zukommt.

Obgleich sich die Chromatogramme der Kaffeehaus-Analysen unterscheiden, konnte sehr gut gezeigt werden, dass sehr wohl Parallelen, was die Aromaanalyse der Innenraumluft betrifft, existieren.

In einem erstellten Bewertungsbogen wurden die wahrgenommenen Eindrücke über das jeweilige Kaffeehaus notiert. Dieser Bogen erfasste neben Datum und Uhrzeit auch allgemeine Informationen, welcher der Auswertung dienlich waren.

Natürlich spielen auch Faktoren, wie beispielsweise das Wetter eine tragende Rolle, da bei kalten, winterlichen Temperaturen ein Kaffeehausbesuch sicherlich häufiger ist als in warmen Sommermonaten. Des Weiteren sind auch die Besucheranzahl und das Rauchverhalten für den Duft im Klassischen Wiener Kaffeehaus ausschlaggebend. Hierzu ist auch die Räumlichkeit des Kaffeehauses zu nennen. Im *Kleinen Café* oder in der Café-Konditorei *Aida*

können sich Gerüche aufgrund ihrer kleinen Größe unter Umständen weniger verflüchtigen, verglichen mit dem *Café Ritter*. Auffällige Gerüche, die von diversen angebotenen Speisen oder kosmetischen Mitteln herrühren, wurden als Fremdgerüche notiert. Beispielsweise nahm man im *Kleinen Café* Notiz über den Geruch nach frischen Kräutern, dementsprechend konnten viele Substanzen „eingefangen“ werden, die sich auf Gemüse und aromatische Kräuter zurückführen ließen. Im *Café Ritter* konnte man einige Substanzen aufzeichnen, die durch angebotene Speisen, wie Zwiebelsuppe oder Würstel mit Pommes, erklärbar sind. In der *Aida*-Filiale konnte der wohlriechende Kaffeeduft gut wahrgenommen und teils auch zur Detektion gebracht werden. Außerdem konnten viele Substanzen gefunden werden, welche auf das reichhaltige Mehlspeisenangebot zurückzuführen sind.

Jeder Gast trägt, der eine mehr der andere weniger, zum Duft im Wiener Kaffeehaus bei, da er einen „Eigengeruch“ in Form von Parfüms oder anderen kosmetischen Mitteln aufweisen kann.

Viele Substanzen kommen in der Umwelt ubiquitär vor und werden somit auch erfasst. Nennenswert sind hier die BTX-Aromaten sowie die Trimethylbenzole oder auch Ethylbenzol. Auch Naphthaline und Styrol konnten in diesen Wiener Kaffeehäusern nachgewiesen werden. Zudem sind diese aromatischen Verbindungen nach den Autoren *Nijssen et al.* (1996) als Röstkaffeestoffe verzeichnet [NIJSEN et al., 1996].

Vorherrschend in allen Kaffeehaus-Analysen waren Tabak-Ingredienzien, wie Nikotin, Nikotyrin oder Nikotinaldehyd, deren Intensität in den achtstündigen Chromatogrammen stark variierte. Auch Triacetin und Myosmin sowie Zimtaldehyd, Menthon und Menthol konnten in allen ausgewählten Wiener Kaffeehäusern nachgewiesen werden. Wobei zu erwähnen gilt, dass die drei letzteren eine Vielzahl anderer Ursprungsquellen aufweisen.

Ein wichtiger Teil der Kaffeehaus-Analysen waren die Kaffeearomastoffe, deren Anteil nicht außer Acht gelassen werden darf. Es konnten einige im Kaffeehaus detektierten Kaffeeröststoffe (im *Aida* nahezu 70), durch Analysen der Kaffeegetränke zugeordnet werden. Eine Vielzahl an Furan-Verbindungen, unter anderem Furfurylalkohol und Furfural, oder Methyl- Dimethyl- und

Acetylfuran konnten mehrmals aufgefunden werden. Ebenso bedeutend sind die basischen Aromastoffe, wobei unter anderem Pyridin, Methyl- und Dimethylpyrazin oder Acetylpyrrol mehrmals in den Kaffee- und in den Kaffeehaus-Analysen erschienen. In der *Aida*-Filiale konnten zusätzlich etliche Säuren – Butter-, Propion- und Valeriansäure – welche anhand der Liste nach *Nijssen et al.* (1996) bzw. durch die Kaffeegetränke dem Kaffeearoma zugeordnet werden konnten. Des Weiteren kam es immer wieder zur Detektion von Limonen sowie Pyrrol, Indol und der Picoline. In den drei Kaffeehäusern konnten die Kohlenwasserstoffe, Tetra-, Penta- und Hexadecan sowie Decan und auch Piperylen aufgezeichnet werden, die ebenfalls als Kaffeearomastoffe charakterisiert wurden. Zusätzlich konnten viele zur Gruppe der Alkohole zählenden Verbindungen – wie  $\alpha$ -Terpineol und Linalool – in diesen Kaffeehäusern aufgezeigt werden. Diese kommen zudem – wegen ihres angenehmen Geruchsprofils – in vielen Duftkompositionen vor. Auch die phenolischen Kresole und der bittermandelartig riechende Benzaldehyd erwiesen sich als Bestandteil der Innenraumluft dieser Wiener Kaffeehäuser.

Viele Röstkaffeestoffe kommen in so geringen Mengen im Kaffee vor, dass sie in einem Kaffeehaus – auch wenn es in diesem sehr intensiv nach Kaffee duftet – nicht mehr nachgewiesen werden können. Außerdem gilt zu erwähnen, dass jeder einzelne Substanz-Peak viele Ursprungsquellen haben kann, welche den jeweiligen Peak ausmachen oder dessen Intensität verstärken. Es konnte im Rahmen dieser Untersuchung nicht ausfindig gemacht werden, welcher Quelle eine aufgefundene Substanz zuzuschreiben ist.

## KAPITEL VI

### 6. ZUSAMMENFASSUNG

Da die Wiener Kaffeehaus-Tradition in Österreich einen hohen Stellenwert besitzt, wurde in dieser Arbeit der Frage, nach dem Duft in klassischen Wiener Kaffeehäusern nachgegangen und anhand drei ausgewählter Kaffeehäuser dokumentiert. Mit dem Ziel möglichst viele Röstkaffeesubstanzen nachzuweisen, wurde mittels HS-SPME-Methode die Raumluft des *Kleinen Cafés*, des *Café Ritter* und der Café-Konditorei *Aida* „eingefangen“ und analysiert. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Kopplung mit GC-MS gewählt, welche im „Zusammenspiel“ mit der HS-SPME als effiziente und innovative Analysemethode gilt.

Die achtstündige Innenraumluft-Messung zeigte sich in allen Kaffeehäusern als optimal, denn es konnten etliche der nach *Nijssen et al.* (1996) charakterisierten 835 Kaffeearomastoffe nachgewiesen werden. Vor allem die Substanzklassen der Furane, Kohlenwasserstoffe, Basen und Phenole waren stark vertreten. Hilfestellung dazu leistete die parallel laufende Analyse der Kaffeegetränke *Robusta Madagaskar*, *Arabica Santos* und *Arabica Sidamo*.

Die Chromatogramme zeigten Unterschiede, dennoch sind zwischen den Kaffeehaus-Analysen Parallelen zu finden. Beispielsweise waren in allen Kaffeehäusern Tabakrauch-Bestandteile sehr präsent: Nikotin konnte in allen Cafés mit ausgesprochen hoher Intensität nachgewiesen werden. Ein zusätzlicher Zigarettenrauch-Ausschlusstest bestätigte die Resultate.

Natürlich spielen Faktoren wie beispielsweise Wetter oder Gästefrequenz sowie angebotene Speisen eine wichtige Rolle im Kaffeehaus. Viele Substanzen kommen in der Umwelt ubiquitär vor und werden somit auch in der Innenraumluft erfasst. Jeder einzelne Kaffeehaus-Besucher trägt zum Duft im

Wiener Kaffeehaus bei, da er einen „Eigengeruch“ in Form von Parfüms oder anderen kosmetischen Mitteln aufweisen kann.

Zusammenfassend kann über die Innenraumluft der im Rahmen dieser Arbeit getesteten Kaffeehäuser gesagt werden, dass der Zigarettengeruch – vor allem im *Café Ritter* – sehr dominant war. Kaffeearomastoffe konnten in allen drei Kaffeehäusern nachgewiesen werden. Viele Röstkaffeestoffe kommen in so geringen Mengen im Kaffee vor, dass sie in einem Kaffeehaus – auch wenn das wohlriechende Kaffeearoma wahrzunehmen ist – nicht mehr leicht nachgewiesen werden können.



## KAPITEL VII

### 7. SUMMARY

This thesis investigated the smells in classic Viennese coffeehouses based on three selected cafés since the Viennese coffeehouse-tradition plays such an important role in Austria. Focusing on the objective of detecting as many coffee substances as possible, the air in *Kleines Café*, *Café Ritter* and *Café-Konditorei Aida* was “trapped” and analyzed using an optimized HS-SPME-method. In combination with GC-MS. Together with HS-SPME this proved to be an efficient and innovative analyzing method.

An 8-hour air measurement was shown to be optimal in all of the coffeehouses, because many of the 835 coffee flavoring substances characterized in *Nijssen et al.* (1996) could be detected. Especially the substance classes of furans; hydrocarbons; bases and phenols were present most notably. Parallel analysis of the coffees *Robusta Madagaskar*, *Arabica Santos* and *Arabica Sidamo* supported the research.

Although the chromatograms showed differences, there were still similarities to be found between the analyses of the cafés. For example, tobacco smoke components were very present in each of them. Nicotine could be proven with high intensity everywhere. An additional cigarette smoke elimination test confirmed these results.

Of course, factors such as weather conditions or guest frequency as well as offered meals play an important role in these coffeehouses. Many aroma compounds are present ubiquitously in the environment and are therefore also registered in the room air. Every single guest influences the smell in Viennese coffeehouses, since he or she may bear an “inherent smell” in the form of perfumes or other cosmetics.

Summing up, what can be said about the compartment air in the cafés tested within this thesis is that cigarette smoke was very present, especially at

*Café Ritter.* Coffee flavoring substances could be detected in all three cafés. When it comes to actual roast coffee compounds, however, the headspace often contained so little of these that they could not be smelled.

## KAPITEL VIII

### 8. LITERATURVERZEICHNIS

AIDA CAFÉ-KONDITIONEIREI, Wien. URL:

<http://www.aida.at/cafe/index.php?mode=geschichte&raum=1>.

Wien, 29. September 2008.

AKIYAMA M, MURAKAMI K, HIRANO Y, IKEDA M, IWATSUKI K, WADA A, TOKUNO K, ONISHI M, IWABUCHI H. Characterization of Headspace Aroma Compounds of Freshly Brewed Arabica Coffees and Studies on a Characteristic Aroma Compound of Ethiopian Coffee. J. Food Sci., 2008; **73**: 335-346.

ARTHUR CL, PAWLISZYN J. Solid Phase Microextraction with Thermal Desorption Using Fused Silica Optical Fibers. Anal. Chem., 1990; **62**: 2145-2148.

BALTUSSEN E, CRAMERS CA, SANDRA PJF. Sorptive sample preparation – a review. Anal. Bioanal. Chem., 2002; **373**: 3-22.

BAUER K, GARBE D, SURBURG H. Common Fragrance and Flavor Materials: Preparation, Properties and Uses; Wiley-VCH, Weinheim, 1997<sup>3</sup>; 8-108.

BELARDI RP, PAWLISZYN J. The application of chemically modified fused silica fibers in the extraction of organics from water matrix samples and their rapid transfer to capillary columns. Water poll. res. journal can., 1989; **24**: 179-191.

BELITZ HD, GROSCH W, SCHIEBERLE P. Lehrbuch der Lebensmittelchemie; Springer Verlag, Berlin, 2008<sup>6</sup>; 346-409; 453-467; 795-1017.

BERNHEIMER O. Zur Kenntnis der Röstproducte des Caffees. Monatsh. Chem., 1880; **1**: 456-467.

BICCHI C, IORI C, RUBIOLO P, SANDRA P. Headspace Sorptive Extraction (HSSE), Stir Bar Sorptive Extraction (SBSE), and Solid Phase Microextraction (SPME) Applied to the Analysis of Roasted Arabica Coffee and Coffee Brew. J. Agric. Food Chem., 2002; **50**: 449-459.

BLANK I, SEN A, GROSCH W. Potent odorants of the roasted powder and brew of Arabica coffee. Z. Lebensm. Unters. Forsch. 1992; **195**: 239-245.

BLANK I, GROSCH W. On the Role of (-)-2-Methylisoborneol for the Aroma of Robusta Coffee. J. Agric. Food Chem., 2002; **50**: 4653-4656.

CZERNY M, MAYER F, GROSCH W. Sensory Study on the Character Impact Odorants of Roasted Arabica Coffee. J. Agric. Food Chem., 1999; **47**: 695-699.

CZERNY M, GROSCH W. Potent Odorants of Raw Arabica Coffee. Their Changes during Roasting. J. Agric. Food Chem., 2000; **48**: 868-872.

DEIBLER KD, ACREE TE, LAVIN EH. Solid Phase Microextraction Application in Gas Chromatography/Olfactometry Dilution Analysis. J. Agric. Food Chem., 1999; **47**: 1616-1618.

EDELBAUER LJ. Kaffee – Alles über ein Genussmittel, das die Welt veränderte; Pichler Verlag, Wien, 2003; 9-16; 20-26; 33-48.

EDELBAUER LJ. Persönliche Mitteilung. Kaffeeinstitut Wien, 2008.

ELMADFA I, LEITZMANN C. Ernährung des Menschen. Verlag Eugen Ulmer GmbH & Co, Stuttgart (Hohenheim): 2004<sup>4</sup>: 358-361.

FRANZKE C. Allgemeines Lehrbuch der Lebensmittelchemie; B. Behr's Verlag GmbH & Co, Hamburg, 1996<sup>3</sup>; 256; 280; 624.

GERHARDS P, BONNS U, SAWAZKI J, SZIGAN J, WERTMANN A. GC/MS in der klinischen Chemie; VCH Verlags GmbH, Weinheim, 1997; 7-26.

GRAFINGER H. Kaffeewissen; Österreichischer Kaffee- und Tee-Verband, Zaunergasse 1-3, 1030 Wien, 2005.

URL: <http://www.teeverband.at/cms/cms.php?pageName=23>. 29. September 2008.

GROSCH W. Determination of potent odorants in foods by aroma extract dilution analysis (AEDA) and calculation of odour activity values (OAVs). *Flavour Fragrance J.*, 1994; **9**: 147-158.

GROSCH W. Warum riecht Kaffee so gut? Aromastoffen auf der Spur - von der Headspace-Analyse zur Duftsimulation. *Chemie in unserer Zeit* 1996; **3**: 126-133.

GROTE C, PAWLISZYN J. Solid-Phase Microextraction for the Analysis of Human Breath. *Anal. Chem.*, 1997; **69**: 587-596.

HOLSCHER W, STEINHART H. Aroma compounds in green coffee. Kraft Jacobs Suchard, Coffee Research and Development, Bremen, Ger, Publisher: ASIC, Bremen, Ger, 1995; **37**: 785-803.

HÜBSCHMANN HJ. Handbuch der GC/MS – Grundlagen und Anwendung; VCH Verlags GmbH, Weinheim, 1996; 95-118; 139; 214; 226-233.

HULPKE H, KOCH HA, WAGNER R (Hrsg.). Römpp Lexikon Umwelt; Georg Thieme Verlag, Stuttgart, 1993<sup>8</sup>; 146-147; 439-440; 486-487; 574; 687-688; 707.

JORDÃO AM, RICARDO-DA-SILVA JM, LAUREANO O, ADAMS A, DEMYTTENAEREJ, VERHÉ R, DE KIMPE N. Volatile composition analysis by solid-phase microextraction applied to oak wood used in cooperage (*Quercus pyrenaica* and *Quercus petraea*): effect of botanical species and toasting process. *J. Wood Sci.*, 2006; **52**: 514–521.

KATAOKA H, LORD HL, PAWLISZYN J. Applications of solid-phase microextraction in food analysis. *J. Chromatogr. A*, 2000; **880**: 35-62.

KOZIEL JA, INMAN N. Sampling and sample-preparation strategies based on solid-phase microextraction for analysis of indoor air. Trends in Analytical Chemistry, 2002; **21**: 840-850.

MARTINEK T. Kaffeehäuser in Wien; Falter Verlag, Wien, 1996<sup>3</sup>; 74-75; 228.

MARTINETZ D, HARTWIG R. Taschenbuch der Riechstoffe: Ein Lexikon von A – Z; Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt am Main, 1998.

MASUDA H, MIHARA S. Olfactive Properties of Alkylpyrazines and 3-Substituted 2-Alkylpyrazines. J. Agric. Food Chem., 1988; **36**: 584-587.

MAYER F, CZERNY M, GROSCH W. Sensory study of the character impact aroma compounds of a coffee beverage. Eur. Food Res. Technol., 2000; **211**: 272-276.

MERCKEL C, PRAGST F. Tabakzusatzstoffe in Zigaretten – Verwendungszweck und Gefahrenpotential, J. Verbr. Lebensm.; 2007; **2**: 287-301.

MERCKEL C, PRAGST F, RATZINGER A, AEBI B, BERHARD W, SPORKERT F. Application of headspace solid phase microextraction to qualitative and quantitative analysis of tobacco additives in cigarettes. J. Chromatogr. A, 2006; **1116**: 10-19.

MERCKEL C, PRAGST F. Analyse von Zigaretten auf Zusatzstoffe – Zusammenfassung des Berichtes zum Projekt Tabakzusatzstoffe; Im Auftrag des Bundesamtes für Gesundheit (BAG); 2005; 1-10.

MERCKEL C, PRAGST F. Abschlussbericht (überarbeitet) Projekt Tabakzusatzstoffe; Im Auftrag des Bundesamtes für Gesundheit (BAG) der Schweiz; Vertrag Nr. 02.001151/2.26.02.-39; 2005.

MIHARA S, MASUDA H. Structure-Odor Relationship for Disubstituted Pyrazines. J. Agric. Food Chem., 1988; **36**: 1242-1247.

NAKAMURA S, SAKUI N, TSUJI A, DAISHIMA S. Determination of 2-methylisoborneol and geosmin in aqueous samples by static headspace-gaschromatography-mass spectrometry with ramped inlet pressure. J. Sep. Sci., 2005; **28**: 2511–2516.

NIJSSEN LM, VISSCHER CA, MAARSE H, WILLEMSSENS LC, BOELENS MH. Volatile compounds in food. Qualitative and quantitative data. TNO-CIVO Food Anal. Inst., Zeist, Niederlande, 1996<sup>7</sup>; 1.12-16; 5.5-11; 23.9-12; 25.11-18; 29.2-12; 38.1-9; 44.1-9; 52.3-20; 53.6-7; 57.7-11; 63.5-21; 70.5-37; 71.1-16; 72.3-23; 73.3-18; 144.3-8; 176.1-4; 182.1-7.

OHLOFF G. Riechstoffe und Geruchssinn: Die molekulare Welt der Düfte; Springer Verlag, Berlin, 1990.

OPLL F. Kapuziner, Einspänner, Schalerl Gold. Geschichte der Wiener Kaffeehäuser; Wiener Stadt- und Landesarchiv Magistratabteilung 8 (Hrsg.), Wien, 2006; **73**: 4-11.

OTTO M. Analytische Chemie; Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2006<sup>3</sup>; 324-344; 433-470; 529-530.

PLUSCHKE P. Luftschadstoffe in Innenräumen: ein Leitfaden; Springer Verlag, Berlin, 1996; 70; 103; 126-139; 144-151.

PREIBISCH H. Die Kaffee-Bibliothek – vom Anbau bis zum Endprodukt; Deutscher Kaffee-Verband, Pickhuben 3, 20457 Hamburg, 2004. URL: <http://www.kaffeeverband.de/pdf/kaffeebibliothek.pdf>. 29. September 2008.

REICHSTEIN T, STAUDINGER H. Verfahren zur Herstellung eines Produktes, welches für die Aromatisierung von Nahrungs- und Genussmitteln, insbesondere von Kaffeesurrogaten, bestimmt ist. Reichspatentamt Patentschrift, Nr. 489613, Kl. 53d, Gr. 1, 1925ab.

REICHSTEIN T, STAUDINGER H. Verfahren zur Herstellung von Furfurylmercaptan. Reichspatentamt Patentschrift, Nr. 484244, Kl. 12o, Gr. 23, 1926ab.

RHOADES JW. Analysis of the Volatile Constituents of Coffee. J. Agric. Food Chem., 1960; **8**: 136-141.

ROTH H, KORMANN W. Duftpflanzen, Pflanzendüfte: Ätherische Öle und Riechstoffe; Ecomed Verlagsgesellschaft AG & Co. KG, Landsberg, 1997; 205-273; 337-479.

ROTHER M, THOMAS B. Aromastoffe des Brotes. Versuch einer Auswertung chemischer Geschmacksanalysen mit Hilfe des Schwellenwertes. Z. Lebensm. Unters. Forsch., 1963; **119**: 302-310.

SALAMON D. Persönliche Mitteilung. Mitarbeiterin der Fachgruppe Wien der Kaffeehäuser, Wirtschaftskammer Wien, 30. September 2008.

SCHIEBERLE P, GROSCH W. Identification of Potent Flavor Compounds Formed in an Aqueous Lemon Oil/Citric Acid Emulsion. J. Agric. Food Chem., 1988; **36**: 797-800.

SCHWEDT G. Taschenatlas der Analytik; Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2007<sup>3</sup>; 122; 142-144; 164-166.

SEMMELOCH P, GROSCH W. Analysis of Roasted Coffee Powders and Brews by Gas Chromatography-Olfactometry of Headspace Samples. Lebensm. -Wiss. u. -Technol., 1995; **28**: 310-313.

SEMMELOCH P, GROSCH W. Studies on Character Impact Odorants of Coffee Brews. J. Agric. Food Chem., 1996; **44**: 537-543.

SEMMELOCH P, LASKAWY G, BLANK I, GROSCH W. Determination of potent odorants in roasted coffee by stable isotope dilution assays. Flavour Fragrance J., 1995; **10**: 1-7.

SIGMA-ALDRICH CHEMIE GMBH. Solid Phase Microextraction – troubleshooting guide, Bulletin 928, 2001. URL:  
<http://www.sigmaaldrich.com/etc/medialib/docs/Supelco/Bulletin/11122.Par.0001.File.tmp/11122.pdf>. 20. Oktober 2008.



SILWAR R, KAMPERSCHROER H, TRESSL R. Gas chromatographic-mass spectrometric study of roasted coffee aroma – quantitative determination of steam-volatile aroma constituents. Chem. Mikrobiol. Technol. Lebensm., 1987; **10**: 176-187.

STADLER C, THALER W (Hrsg.). „Aida“: mit reiner Butter; Verlag Christian Brandstätter, Wien, 1995; 7-12.

STAUDINGER H. Anleitung zur organischen qualitativen Analyse. Springer Verlag, Berlin, 1968<sup>7</sup>; 123.

STEGLICH W, FUGMANN B, LANG-FUGMANN S (Hrsg.). Römppe encyclopedia natural products; Georg Thieme Verlag, Stuttgart, 2000; 155; 302; 319; 377-378; 391; 414; 445.

STIEN J. Festphasenmikroextraktion (SPME) – Eine Alternative zu klassischen Extraktionstechniken; Dissertation, Technischen Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, 2001; 6-8.

TEPLY K. Die Einführung des Kaffees in Wien; Kommissionsverlag Jugend und Volk Wien - München, Wien, 1980<sup>6</sup>; 5-21; 56-79; 104; 158-187.

TEUFEL C, CLAUSS S. Coffee – Alles was man über Kaffee wissen sollte; Zabert Sandmann Verlag, München, 2004; 72-88.

TEUTSCH IA. Einfluss der Rohkaffeeverarbeitung auf Aromastoffveränderung in gerösteten Kaffeebohnen sowie im Kaffeegetränk; Dissertation, Technische Universität München, 2004; 49-68.

VAS G, VÈKEY K. Solid-phase microextraction: a powerful sample preparation tool prior to mass spectrometric analysis. J. Mass Spectrom., 2004; **39**: 233-254.

VEIGL H. Wiener Kaffeehausführer; Verlag Kremayr & Scheriau, Wien, 1989; 59; 83.

WALLPACH C. Der Stellenwert von Public Relations und deren Einfluss auf die Markenpolitik am Wiener Kaffeehausmarkt; Diplomarbeit, Human- und Sozialwissenschaftliche Fakultät der Universität Wien, 2003; 113-115.

WURMDOBLER C. Kaffeehäuser in Wien; Falter Verlag, Wien, 2005; 103-105; 137-139:

YANG X, PEPPARD T. Solid-Phase Microextraction for Flavor Analysis. J. Agric. Food Chem., 1994; **42**: 1925-1930.

## KAPITEL IX

### 9. ANHANG

#### Bewertungsbogen

Kaffeehaus: \_\_\_\_\_ Nr.: \_\_\_\_\_

Datum: \_\_\_\_\_

Uhrzeit: \_\_\_\_\_



universität  
wien

SPME- Standort: \_\_\_\_\_

Dauer der Messung: \_\_\_\_\_

Verwendete Kaffeesorte: \_\_\_\_\_

Art der Kaffeezubereitung: \_\_\_\_\_

Tabak:

- Raucherzone JA NEIN

- Zigarettengeruch wahrnehmbar JA NEIN

Auffällige Fremddüfte: \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

Allgemeine Eindrücke im Kaffeehaus: \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

Infrastruktur: \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

Wetter: \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

Sonstige Anmerkungen: \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

# CURRICULUM VITAE



## PERSÖNLICHE DATEN

*Name:* Patricia Pauzenberger  
*Adresse/Kontakt:* Pantzergasse 2  
1190 Wien  
patricia123456@gmx.net  
*Geburtsdaten:* 12. November 1979  
*Staatsbürgerschaft:* Österreich

## AUSBILDUNG

1986-1990 Volksschule Kallham/OÖ  
1990-1994 Hauptschule Neumarkt/OÖ  
1994-1995 Polytechnischer Lehrgang Neumarkt/OÖ  
1995-1998 Ausbildung zur Bürokauffrau in Gallspach/OÖ  
1998-2000 Ausbildung zur Bäckerin in Taufkirchen/OÖ  
2000-2002 Studienberechtigungsprüfung in Linz/OÖ  
2001 Außerordentliche Studentin der Universität Wien  
seit 2002 Ordentliche Studentin der Universität Wien; Studium der Ernährungswissenschaften;  
Wahlschwerpunkt: Lebensmittelproduktion und –technologie

## STUDIENRELEVANTE PRAKTIKA

2007 Produktion und Technologie von Wein: Weinbau Killmeyer in Raggendorf/NÖ (1 Monat)  
2008 AGES (2 Monate)

**BERUFLICHE TÄTIGKEITEN**

April bis Juli 2004, 2005, 2006	Landschaftspflegerin: Gärtnerei Fellner in Bockfließ/NÖ
Jänner bis Juni 2008 und Dezember 2008	Österreichische Agentur für Gesundheit und Ernährungssicherheit GmbH (AGES)/Wien
Mai 2008	Ausbildung zur Kaffee-Expertin/VHS Hietzing Wien
August 2008	Bäckerin in Geisenheim/OÖ

**WEITERE QUALIFIKATIONEN**

Sprachkenntnisse:	Englisch
EDV:	MS Office

Wien, im April 2009

.....